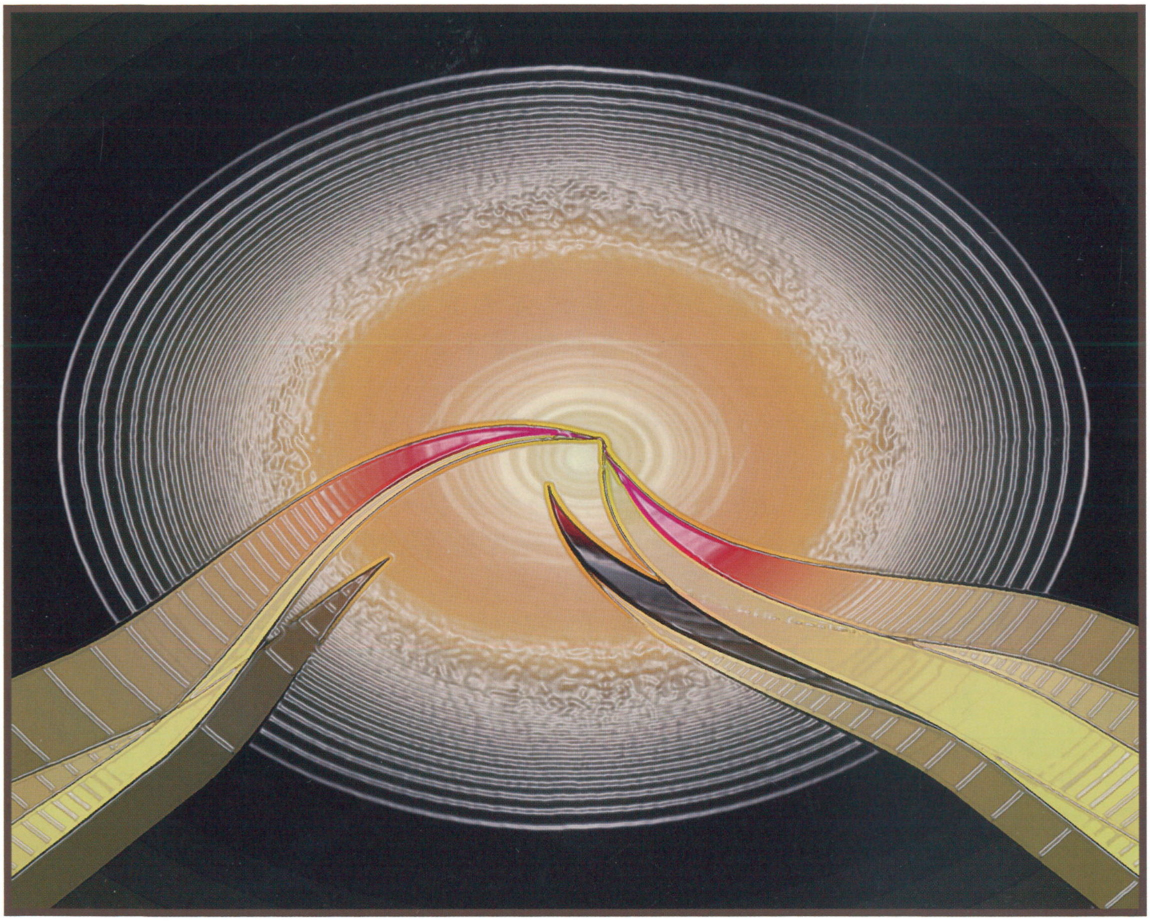
昭和38年7月2日第3種郵便物認可
2011年2月1日発行　第49巻2号　毎月1回1日発行
ISSN 0386—2240

数理科学

2
2011

特集 物理現象を読み解く数学的手法
統計物理のための新しい数学



No.572
サイエンス社

MATHEMATICAL SCIENCES
Number 572 February 2011

物理現象を読み解く数学的手法

統計物理のための新しい数学

表紙：戸川　隼人

お得な定期購読をおすすめします

毎号確実に御手元へ

地域によって書店店頭に陳列されない場合があります．**郵送料小社負担**にて確実に御手元へ届く定期予約購読をおすすめします．

予約購読は 1 年間（本誌のみ）11,000 円，半年間（本誌のみ）5,500 円．（税込み価格）

造本コストは更に上昇気味です．小社としてもあらゆる努力をもって廉価で提供してゆきたいと思っておりますが，定価改定の止むなき事態がかんがえられます．この場合予約購読期間中のものにつきましては料金据置きとなります．なお，臨時別冊のご注文については，本誌予約購読者の方には，商品到着後のお支払いにて承ります．

お申し込みは本誌とじ込みの振替用紙を御利用下さい．

数理科学特集一覧

63 年/7～2007 年/11 省略
2007 年/12「時空」への問いかけ
2008 年/1 現象を視る
/2 ゲージ重力対応
/3 現代物理のための数学キーワード
/4 現代数学はいかに使われているか［解析編］
別冊 多様体の広がり
/5 物理と数学の難所
/6 線形代数の力
/7 物理的思考法のすすめ
/8 数の魅力
/9 トポロジカルな弦の世界
/10 ポアンカレ
別冊 対称性と保存則
/11 物理と論理
/12 確率論的物理観
2009 年/1 グラフィックでわかる物理
/2 発展する量子力学
/3 方程式に潜む対称性
/4 現代数学はいかに使われているか［幾何編］
別冊 代数学の魅力
/5 微積分を楽しむ
/6 現象と物理概念を結ぶ方程式
/7 現代物理の世界像
/8 複素数
/9 シュレーディンガー
/10 数学と物理に広がる不変量
別冊 量子重力理論
/11 可積分系の世界
/12《原理》の探求
2010 年/1 無限次元の魅力
/2 数学の可視化
/3 物理数学の効用
/4 現代数学はいかに使われているか［確率編］
別冊 現代幾何学の発展
/5 物理学事始め
/6 現代幾何と方程式
/7 物理学と行列
/8 力の統一にむけて
/9 南部陽一郎
/10 曲面の不思議
/11 連続から離散へ
/12 物理における《破れ》と調和
2011 年/1 数論の探求

数理科学臨時別冊一覧

09 年/12 ε–δ 論法再入門
10 年/1 多彩な量子の世界
10 年/3 超関数・フーリエ変換入門
10 年/5 問題例で深める物理
10 年/6 非線形現象と微分方程式
10 年/7 数物系のための圏論
10 年/9 超弦理論を学ぶための場の量子論
10 年/10 重点解説 ジョルダン標準形
10 年/11 重点解説 ベクトル・テンソル
10 年/12 行列解析の基礎
11 年/1 超弦理論の基礎

「数理科学」のバックナンバーは下記の書店・生協の自然科学書売場で特別販売しております

紀伊國屋書店本店（新宿）
紀伊國屋書店新宿南店
あおい書店中野本店
オリオン書房ノルテ店（立川）
くまざわ書店本店（八王子）
くまざわ書店桜ヶ丘店（多摩）
書泉グランデ（神田）
書泉ブックタワー（秋葉原）
三省堂本店（神田）
リブロ池袋店
ジュンク堂書店（池袋）
ジュンク堂書店（新宿）
芳林堂（高田馬場）
MARUZEN & ジュンク堂渋谷店
八重洲ブックセンター（東京駅前）
丸善丸の内本店（東京駅前）
ブックファースト青葉台店（横浜）
栄松堂ジョイナス店（横浜）
有隣堂イセザキ町本店（横浜）
有隣堂西口・東口（横浜）
有隣堂厚木店（厚木）
文教堂ブックセンター（川崎）
ジュンク堂書店（盛岡）
ジュンク堂書店（新潟）
戸田書店静岡本店
ジュンク堂大阪本店
紀伊國屋書店梅田店（大阪）
旭屋本店（大阪）
アバンティブックセンター（京都）
ジュンク堂書店（京都）
ジュンク堂京都 BAL 店
ジュンク堂書店（神戸）
ジュンク堂三宮駅前店（神戸）
ジュンク堂書店（大分）
喜久屋書店倉敷店
MARUZEN & ジュンク堂広島店
紀伊國屋書店福岡店
紀伊國屋書店福岡本店
ジュンク堂福岡店
ジュンク堂鹿児島店
紀伊國屋書店新潟店
金港堂（仙台）
金港堂パーク店（仙台）
ジュンク堂書店（仙台）
鹿島ブックセンター（いわき）
友朋堂（つくば）

――大学生協・売店――

東京大学 本郷・駒場
東京工業大学 大岡山・長津田
東京理科大学 新宿
早稲田大学 理工学部
慶応義塾大学 矢上台
福井大学
筑波大学 大学会館書籍部 第一学群書籍部
埼玉大学
名古屋工業大学・愛知教育大学
大阪大学・神戸大学 ランス
京都大学・九州工業大学
東北大学 理薬・工学
室蘭工業大学
徳島大学 常三島
愛媛大学 城北
山形大学 小白川
島根大学
学習院大学 成文堂
北海道大学 クラーク店
熊本大学
名古屋大学

February 2011 MATHEMATICAL SCIENCES Number 572

特集／物理現象を読み解く数学的手法

はじめに

物理のための数学の多様性と普遍性

出口 哲生

数学と物理学の関係は古くかつ新しい．最も古くはニュートン力学と微積分の関係が有名であるが，現在でも新しい数学的手法が次々に発展している．その理由として考えられることは，物理学を表現するために数学は本質的に必要な道具であり，物理科学の発展のためには新しい数学が欠かせない，ということである．それでは現在，物理から数学へ，どのような要請がなされているのであろうか．

新しい数学を求める根源的な動機の例として，物質の仕組みを理解したい，という物理学の究極の目標の一つを挙げることができる．例えば鉄はなぜ磁石の性質を示すのか，水を凍らせるとなぜ氷ができるのか，など相転移の現象や，生命現象を支える生体物質はどうやって多様な機能を実現させているのか，など挙げれば数限りなく学問的な問いかけあるいは問題意識が存在する．これらはすべて，自然現象を理論的に理解したい，という人間の根源的な知的欲求に基づくものと理解できるであろう．

今回の特集では物理現象，特に統計物理学に関係する多体の現象を記述する数学的手法についての論文が集められている．ここで多体とは，複数の対象が相互作用することを意味する．さらに分野的に見ると，広い意味で高分子あるいはソフトマターの物理に関連する話題が多い．ソフトマターの物理は，20世紀後半に確立された比較的新しい分野である．様々な新しい数学的手法が必要であり，さらに発展していく可能性が秘められている．非平衡統計力学もいくつか新しい切り口があり，今後さらに展開していくと思われる．今回の特集ではASEPなどの格子模型や作用素環の数学など厳密なアプローチが論じられているが，最近の非平衡系の研究では，他にも様々な話題が報告されており，互いに影響を及ぼしながら研究が進展していくと予想される．この領域分野の全体に活気があって，発展していく気配が感じられる．

幅広い物理現象を記述する数学的手法には様々な種類があり，特に20世紀前半に量子力学が確立された後，物質の物理学が発展するなど，物理学における多様性は拡大した．もはや物理の内容は力学や電磁気学だけというわけではない．一見すると，事例ごとにバラバラに見えるかもしれない．しかし実は，多様性の中にも一貫した普遍性が存在し，自然現象を記述するために導入された様々な数学的手法を一つの統一的な視点から理解することができると思われる．

実際，興味深いことに，例えば経路積分など，物理学のいくつか少数の理論的手法が手をかえ品をかえて，様々な現象に適用される場合が非常に多い．技術的に言えばその結果，いくつかの基本的物理理論を深く理解することによって，数多くの

異なる現象に立ち向かうことができるであろう．しかし哲学的には，統計力学的あるいは熱力学的な自然現象の中には臨界現象に見られるような驚くべき普遍性が存在し，その結果，統一的な視点が可能になると言えるのである．こうして，多様な現象を統計物理学を用いて統一的に理解する枠組みが成立し，物理学的自然観として，一つの有力な視点を提供するのである．

例えば，ランダムウォークはアインシュタインによってブラウン運動を調べるために用いられた数学的道具である．ところが，高分子はたいてい非常に長い分子の鎖でつくられていて，溶液中でのその空間的形状はランダムウォークで表されるものに近い．この結果，高分子の統計的振舞いから動力学的振舞いまで，ランダムウォークの理論を発展させて記述することが可能である．ブラウン運動と高分子は全く異なった対象であるにも関わらず，数学的手法としては同じランダムウォークを用いることができるのである．

現実の高分子鎖が排除体積と呼ばれる太さの効果を持つことから，自己排除的酔歩（Self-Avoiding Walk）の理論が導かれた．一方，高分子を用いてパターン形成を実現することができ，その結果，高分子の自己無撞着場理論などの動力学的な理論を用いて，パターン形成のシミュレーションが行われている．さらに，高分子はソフトマターの重要な研究対象の一つでもある．ランダムウォークはASEPにも登場するが，ASEPは格子模型の一つであり，可積分格子模型を用いた数理物理的研究も行われている．可積分系はもともと力学系の研究から出発したものであり，振動現象がその基本である．こうして，ランダムウォークをキーワードにすると，今回の特集記事のすべての話題が互いに密接に関連していることが見えてくる．

物理学の理論は，一般に，必ずしも数学的に完全な精密さを持っていないかもしれない．しかし，物事をおおざっぱに捉える一方で，全く異なって見える様々な事柄の中に共通の性質を見出し，幅広く一つの見方で整理することができる．私たちはこの普遍性を応用して，自然現象の幅広い多様性を組織的に理解していくことができるであろう．多様性とそれを統御する普遍性の関係を究めていくことにより，新しい自然科学を切り開き，結果的に新しい数学を導くことができるのではないだろうか．一つ一つの精密な部品も大切であるが，その一方，機械が全体としてうまく機能するように制御することも同じように重要なのである．

ここで注目したいことは，物理学における普遍性の視点を通じて，新しい数学を要請する研究上の動機が発展していく可能性である．様々な学問的な成果を近似的ではあっても統一的に見通すことにより，豊かなアイデアをもたらす可能性のある新しい研究領域が次第に見えてくるのではないか，と期待されるのである．このような学問上の戦略的な視点は，従来あまり議論されたことがなかったかもしれない．しかし，現在の日本の学問的水準は十分に成熟しており，今後は前人未踏の領域をあえて探索しなければならない．そこで，そのような視点も今後は役に立つかもしれない．

さて，統計物理のための数学に限定しても，話題の選択の可能性は非常に幅広い．このため，もしも今回の特集記事により，読者が統計物理のための数学の多様性と普遍性を少しでも感じることができるとすれば，それは望外の幸せと言えるであろう．

（でぐち・てつお，お茶の水女子大学理学部）

高次元における Self-Avoiding Walk とレース展開



原　隆

1. はじめに

ランダムウォークは確率論や統計力学において，最も基本的な研究対象の一つである．特に，単純ランダムウォークに「軌跡が自分自身と交わらない」という自己回避条件をつけると，非常に面白く難しいモデルになる．本稿ではこのモデルを中心に，臨界現象と呼ばれる面白い題材の一側面を紹介する．また，このモデルに対する強力な解析方法である「レース展開」を紹介する．

2. 単純ランダムウォーク

2.1 定義

我々の舞台は d-次元の超立方格子 $\mathbb{Z}^d$（各座標が整数である d-次元空間の点の集合）である．$\mathbb{Z}^d$ 上の 2 点 x, y のユークリッド距離は $|x-y|$ と書く．

$x, y \in \mathbb{Z}^d$ とする．x（始点）から y（終点）への n 歩の**単純ランダムウォーク**（simple random walk, 以下 SRW と略記）ω とは，

- $\omega(0) = x$ かつ $\omega(n) = y$ をみたす，$\mathbb{Z}^d$ の $(n+1)$ 個の点の列 $(\omega(0), \omega(1), \dots, \omega(n))$ で，
- ウォークの隣点間の距離が 1，つまり $1 \le j \le n$ に対して $|\omega(j) - \omega(j-1)| = 1$ である

ものを言う．一般にウォーク ω の歩数は $|\omega|$ で表す．$x = \omega(0)$ の一点のみからなるものも便宜上，ゼロ歩の SRW とみなす．

2.2 問題

本稿では特に，以下の 2 つの量を中心に考える．

- 原点 0 から出発する n 歩の SRW の総数 s_n.
- 原点 0 から出発する n 歩の SRW の広がり r_n.

r_n は以下のように定義する．原点出発の n 歩の SRW のそれぞれに同じ重みを与えた平均を考える：

$$\langle f(\omega) \rangle_n^{\mathrm{SRW}} := \frac{\sum_\omega f(\omega)}{\sum_\omega 1} = \frac{1}{s_n} \sum_\omega f(\omega)$$

n 歩の SRW の終点の，原点からの距離の二乗をこの平均操作で平均したもの（の平方根）が r_n で，**平均二乗変位**と呼ぶ：

$$r_n := \left\{ \left\langle |\omega(n)|^2 \right\rangle_n^{\mathrm{SRW}} \right\}^{1/2}. \qquad (1)$$

なお x から y への n 歩の SRW の数 $s_n(x, y)$ とその母関数（**二点関数**）も定義する：

$$C_p(x, y) := \sum_n s_n(x, y) p^n = \sum_{\omega : x \to y} p^{|\omega|} \quad (2)$$

（p は定数で，和は x から y へのすべての SRW についてとる）．$C_p(x, y)$ は $y - x$ のみの関数である．

また SRW の**スケーリング極限**を考えておこう．原点を始点とする n 歩の SRW ω の各点 $\omega(i)$ を，時間方向に n^{-1}，空間方向に $n^{-1/2}$ に縮める：

$$X_n\left(\frac{j}{n}\right) := \frac{1}{\sqrt{n}} \omega(j), \quad (j = 0, 1, 2, \dots, n).$$

j/n 以外の $0 < t < 1$ での $X_n(t)$ $(0 \le t \le 1)$

は上の点を線分でつないで得られるものと定義する．そしてこのように得られた折れ線 $X_n(t)$ のそれぞれに同じ重みを与えたものの分布を考える．

2.3 解答

まず，$s_n = (2d)^n$ である．なぜなら，歩数が一歩増えるごとに，$(2d)$ 通りの増やし方があるからだ．これから直ちに，(2) の $C_p(0, x)$ は $2d|p| < 1$ なら定義できることがわかる*1)．

平均二乗変位は $r_n^2 = n$ を満たす（**Einstein の関係式**）．これはもちろん初等的に求められるが，本稿では母関数を用いた証明を 4.2 節で与える．

なお，SRW のスケーリング極限がブラウン運動に法則収束することも証明できるが，この証明はそれほど簡単ではない．

3. Self-Avoiding Walk

3.1 定義

x から y への n 歩の **self-avoiding walk** (**SAW**) とは，x から y への n 歩の単純ランダムウォークのうち，**自己回避条件**

> ω は自分自身と交わらない，つまり $i \neq j$ の場合にはいつも $\omega(i) \neq \omega(j)$ である

をみたすものをいう（基本的な文献は 1)）．自己回避条件を課すだけで問題が異常に難しくなることを以下で見るだろう．

3.2 問題

単純ランダムウォークの場合と同様に，以下の 2 つの量に注目しよう．

- 原点から出発する n 歩の SAW の数 c_n．
- **平均二乗変位** $l_n := \left\{ \langle |\omega(n)|^2 \rangle_n^{\mathrm{SAW}} \right\}^{1/2}$．ここで $\langle \cdots \rangle_n^{\mathrm{SAW}}$ は原点から出発するすべての n 歩の SAW に同じ重みを与えた期待値である*2)．

SAW の二点関数 $G_p(x, y)$ は式 (2) での ω の和を x から y への SAW に限定して定義する．

自己回避条件のため，（自明な $d = 1$ の場合を除き）c_n や l_n を陽に計算することはできない．c_n が n について増加することの証明すら全く自明ではない．そこでこれらの量の $n \to \infty$ の漸近形を理解することを目標とする．

3.3 Connective Constant

$d^n \le c_n \le (2d)^n$ であることはすぐにわかる．SAW の数は同じ歩数の SRW の数よりも少ないので右側の不等式が出る．また，座標軸の正の向きにのみ伸びる SRW はすべて SAW になっているので，左側の不等式が出る．

上の結果は c_n が n と共に指数的に増大することを示唆するが，実際に以下が証明できる：

> **定理 1**　極限 $\mu := \lim_{n\to\infty} (c_n)^{1/n}$ が存在する．さらに $c_n \ge \mu^n$ が成り立つ．

上の定数 μ を **connective constant** と呼ぶ．$p_c := 1/\mu$ とすると，この定理から二点関数 G_p は $|p| < p_c$ では定義できることがわかる．なお一般次元で成り立つ c_n の上界としては Kesten による

$$c_n \le \begin{cases} \mu^n \exp\{K n^{1/2}\} & (d = 2), \\ \mu^n \exp\{K n^{2/(2+d)} \log n\} & (d \ge 3) \end{cases}$$

が現在でも最も良い評価である（K は定数）．

（証明）　$m + n$ 歩の SAW を始点から m 歩のところで切ると m 歩の SAW と n 歩の SAW に分かれる．かつ，このようにしてできた 2 つの SAW の組は，もとの SAW が異なれば異なる．よって $c_{m+n} \le c_m c_n$ が成り立ち，$a_n := \log c_n$ に対して

$$a_{m+n} \le a_m + a_n \qquad (3)$$

が結論できる．定理の結論は以下の一般論からすぐに従う．□

劣加法的な数列の一般論

式 (3) を満たす数列 $(a_n)_{n\ge1}$ を**劣加法的**（subadditive）な数列という．このとき，

---

*1)　$d > 2$ では $p = 1/(2d)$ でも定義できるが，本稿では立ち入らない

*2)　この重みを自然な確率過程として実現することは困難である．そのため，SAW は時間発展してできたというより，鎖のようなものだと思うのが良いだろう．実際，SAW は溶液中の長い高分子のモデルとも考えられる．

補題 2 a_n/n が下に有界であるような劣加法的な数列 $(a_n)_{n\geq 1}$ に対しては極限 $\alpha := \lim_{n\to\infty} a_n/n$ が存在し，$a_n \geq \alpha n$ が成り立つ．

（証明） 正の整数 N を固定し，$n \gg 1$ を N で割った答えを l, あまりを k と書こう：$n = Nl+k$. このとき，(3) 式から

$$\frac{a_n}{n} \leq \frac{la_N + a_k}{n} = \frac{l}{Nl+k}a_N + \frac{a_k}{Nl+k} \qquad (4)$$

が成り立つ．N を固定したまま両辺で $n \uparrow \infty$ とすると，$0 \leq k < N$ のままで $l \uparrow \infty$ となるから，

$$\limsup_{n\uparrow\infty} \frac{a_n}{n} \leq \frac{a_N}{N} \qquad (5)$$

を得る（上極限の存在は a_n/n の有界性によって保証される）．次に $N \uparrow \infty$ とすると

$$\limsup_{n\uparrow\infty} \frac{a_n}{n} \leq \liminf_{N\uparrow\infty} \frac{a_N}{N} \qquad (6)$$

が得られる．上極限と下極限が一致するので，$\alpha = \lim_{n\uparrow\infty} \frac{a_n}{n}$ の存在が示された．(5) の左辺は α に等しいから $a_n \geq \alpha n$ も証明された． □

3.4 厳密な結果

これまでの一般論以外，$n \to \infty$ の振舞いについての厳密な結果は，高次元または 2 次元の場合に限られている*3).

定理 3 5 次元以上の SAW では，正定数 A, D が存在して以下の漸近形*4) が満たされる[3~5]：

$$c_n \sim A\mu^n, \quad l_n \sim \sqrt{Dn} \qquad (n \to \infty)$$

上の定数 D を**拡散定数**と言う．

定理 4 5 次元以上の SAW のスケーリング極限は，拡散定数 D の**ブラウン運動**に**法則収束**する[5,6].

以上の結果は，高次元での長い SAW は（定数倍の違いはあれ）単純ランダムウォークと同じように振る舞うことを主張している．

3.5 臨界現象

上の定理 3–4 は統計力学の中心的な研究テーマの一つである**臨界現象**の一例である．SAW の場合には一般の次元でも以下のような予想がある．

- 定数 γ, ν, A, D が存在して $n \uparrow \infty$ では
$$c_n \sim A\mu^n\, n^{\gamma-1}, \quad (l_n)^2 \sim D\, n^{2\nu} \qquad (7)$$
が成り立つ．
- 上の定数 γ, ν を**臨界指数**と呼ぶが，その値はモデルの詳細によらない*5)——これを臨界指数の**普遍性**（universality）と呼ぶ．
- 臨界指数の値は一般に次元によるが，臨界指数は $(2-\eta)\nu = \gamma$ のような関係式をみたす（**スケーリング則**）．η は本稿では触れない臨界指数．
- **上方臨界次元** d_c があり，d_c より高次元では臨界指数は d によらない「簡単な値」になる．SAW の場合，$d_c = 4$ と予想されている．

スケーリング則や普遍性を一般に証明することは統計力学の大きな課題の一つである．

4. レース展開 I——単純ランダムウォーク

定理 3–4 は**レース展開**と呼ばれる手法で証明される．この節ではウォームアップとして，単純ランダムウォークに対するレース展開を行う．

4.1 レース展開の導出

0 から x への二点関数 $C_p(0,x)$ から出発しよう．$C_p(0,x)$ は 0 から x へのすべての SRW に関する和であった．そこで，0 から x への SRW ω をその第一歩で切って，第一歩を $(0,y)$，残りを ω' とする（まずは $x \neq 0$ の場合を考える）：

$$C_p(0,x) = \sum_{\omega:0\to x} p^{|\omega|} = \sum_{y:|y|=1} p \sum_{\omega':y\to x} p^{|\omega'|}.$$

ω' についての和は，y から x へのすべての SRW についてとるから，結果は二点関数 $C_p(y,x)$ になる．$x = 0$ のときには，長さ 0 のウォークからの寄与 1 が右辺に現れることに注意すると，結局

*3) 2 次元での最近の著しい進歩には本稿では言及しない．

*4) $f_n \sim g_n$ とは $\lim_{n\to\infty} f_n/g_n = 1$ となることである．

*5) 本稿ではウォークの一歩が隣り合った点どうしを結ぶモデルのみを考えているが，ウォークの一歩がもっと離れた点をも結ぶことができるモデルも考えられる．そのようなモデルでは μ, A, D の値は本稿のモデルとは異なるが，臨界指数 γ, ν は同じで，モデルの次元 d のみで決まると予想される．

$$C_p(0,x) = \delta_{0,x} + p \sum_{y:|y|=1} C_p(y,x) \qquad (8)$$

が得られる（$\delta_{0,x}$ はクロネッカーのデルタ）．このよく知られた式が SRW に対するレース展開の結果である．

4.2 レース展開の解析

二点関数のフーリエ変換を（$k \in [-\pi,\pi]^d$）

$$\hat{C}_p(k) := \sum_{x\in\mathbb{Z}^d} C_p(0,x) e^{ikx} \qquad (9)$$

によって定義する．二点関数が並進不変であることを思い出して，(8) の両辺をフーリエ変換すると（$\hat{D}(k) := \frac{1}{d}\sum_{j=1}^{d}\cos k_j$）

$$\hat{C}_p(k) = 1 + 2dp\hat{D}(k)\hat{C}_p(k),$$

$$\hat{C}_p(k) = \frac{1}{1-2dp\hat{D}(k)} \qquad (10)$$

となる．C_p（のフーリエ変換）が簡単に求まった．

これから直ちに $s_n = (2d)^n$ が得られる．実際，$k=0$ では $\hat{D}(0)=1$ だから $|p| < (2d)^{-1}$ では

$$\hat{C}_p(0) = \frac{1}{1-2dp} = \sum_{n=0}^{\infty}(2d)^n\, p^n$$

となる．一方，s_n の定義を思い出すと

$$\hat{C}_p(0) = \sum_x C_p(0,x) = \sum_\omega p^{|\omega|} = \sum_n s_n p^n$$

だから，両者を比較して $s_n = (2d)^n$ がわかる．

平均二乗変位については以下のように考える．(10) の両辺を k_j で 2 階微分して $k=0$ とおくと，

$$-\sum_{j=1}^{d}\frac{\partial^2}{\partial k_j^2}\hat{C}_p(0) = \frac{2dp}{(1-2dp)^2} = \sum_{n=1}^{\infty}(2d)^n\, n\, p^n$$

となる．一方，$\hat{C}_p(k)$ の定義を書き直した $\hat{C}_p(k) = \sum_{x,n} s_n(0,x)e^{ikx}p^n$ の両辺を微分して

$$-\sum_{j=1}^{d}\frac{\partial^2}{\partial k_j^2}\hat{C}_p(0) = \sum_{x,n}|x|^2 s_n(0,x)p^n$$

が得られる．両者を比較して

$$\sum_x |x|^2 s_n(0,x) = (2d)^n\, n \qquad (11)$$

を得る．左辺の量は r_n^2 の定義式 (1) の分子だから，両辺を $s_n = (2d)^n$ で割って，$r_n^2 = n$ を得る．

5. レース展開 II——SAW

単純ランダムウォークに対する解析はあまりに簡単だったので，SAW にうつろう．

5.1 SAW のレース展開の導出

0 から x への SAW の 2 点関数 $G_p(0,x)$ を考える．まずは $x \neq 0$ の場合を考え，0 から x への SAW を第一歩 $(0,y)$ で切って残りを ω' と書く：

$$G_p(0,x) = \sum_{\omega:0\to x} p^{|\omega|}$$
$$= \sum_{y:|y|=1} p \sum_{\omega':y\to x} p^{|\omega'|} I[\omega' \not\ni 0]. \quad (12)$$

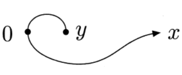
ここで $I[\cdots]$ は条件 $(\cdots)$ が満たされていれば 1，満たされていないなら 0 になる指示関数である．ω が元々 SAW であったことを条件 $\omega' \not\ni 0$ で表した．この条件のため，ω' についての和を簡単に計算することはできない．仕方ないので，包除原理（inclusion-exclusion principle）の手法を用いる．$\omega' \not\ni 0$ の条件を

$$I[\omega' \not\ni 0] = 1 - I[0 \in \omega'] \qquad (13)$$

と書いて，これを (12) へ代入する．結果は

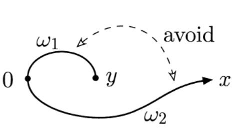
$$G_p(0,x) = \sum_{y:|y|=1} p \sum_{\omega':y\to x} p^{|\omega'|}\left\{1 - I[0\in\omega']\right\}$$

となるが，中括弧の中の第一項の寄与は ω' についての和がとれて，$\sum_{y:|y|=1} p\, G_p(y,x)$ となる．第二項の寄与を模式図にすると

$$\sum_{\omega':y\to x} p^{|\omega'|} I[0\in\omega'] = 0$$


と描ける．そこで ω' を 0 で ω_1 と ω_2 に分けると

$$= \sum_{\substack{\omega_1:y\to 0\\ \omega_2:0\to x}} p^{|\omega_1|}p^{|\omega_2|} I[\omega_1\circ\omega_2 \text{ は SAW}]$$

$$= \sum_{\substack{\omega_1:y\to 0\\ \omega_2:0\to x}}$$


となる．またもや包除原理により $I[\omega_1\circ\omega_2 \text{ は SAW}]$

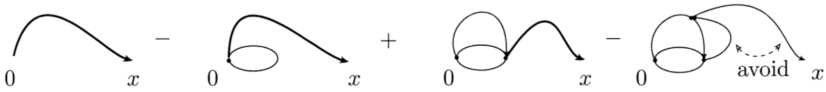
$G_p(0,x) =$ 

図 1 SAW のレース展開の導出における最初の 4 項の模式図．第一項から第三項では太い SAW には制限がついていない

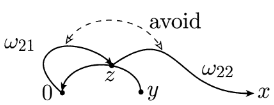
$=1-I[\omega_1$ と ω_2 は交わる$]$ と書くと[*6)]結果として，

$$\sum_{\omega':y\to x} p^{|\omega'|}\, I[0\in\omega'] = G_p(y,0)\,G_p(0,x) - \sum_{\substack{\omega_1:y\to 0\\ \omega_2:0\to x}} p^{|\omega_1|}\, p^{|\omega_2|}\, I[\omega_1 \text{と} \omega_2 \text{は交わる}]$$

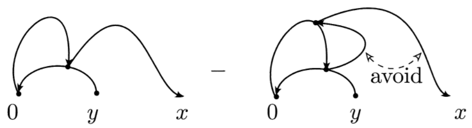
を得る．第二項の「交わる」条件のため，ω_2 についての和は簡単にはとれない．そこで，ω_2 が ω_1 と，（ω_2 の向きで見て）初めて交わったところを z とし，z で ω_2 を ω_{21} と ω_{22} にわける．結果は

$$\sum_{\substack{\omega_1:y\to 0\\ \omega_2:0\to x}} p^{|\omega_1|}\, p^{|\omega_2|}\, I[\omega_1 \text{と} \omega_2 \text{は交わる}]$$

$$= \sum_z \qquad (14)$$



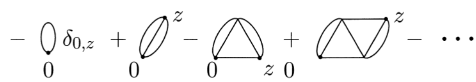
となる．ここで ω_{22} に課せられた条件は直前の ω_{21} のみを避けることである．そこで ω_{22} への制限をなくすように包除原理を使うと，(14) は



となる（ラベルのついてない頂点についてはすべて和を取る）．これまでのところを模式図にまとめたのが図 1 である．最後の項以外は，最後の SAW（太線）には何の制限もついていないので，この SAW についての和は G_p を出す．最後の項の SAW にはその直前の SAW を避けるという制限がついているので，またもや包除原理を用いる．以下くり返すと，SAW に対するレース展開が得られる（剰余項がゼロに行くことは別途証明する）：

$$G_p(0,x) = \delta_{0,x} + p\sum_{y:|y|=1} G_p(y,x) + \sum_z \Pi_p(0,z)\,G_p(z,x). \quad (15)$$

ここで $\Pi_p(0,z)$ は模式的に



と表せる（図の各実線は SAW についての和を表す）．それぞれの SAW についての和には複雑な制限が付いているが，これらはすべて各項を小さくする方向に働くので，ここでは省略した．

5.2 SAW のレース展開の解析

単純ランダムウォークの場合と同様に (15) の両辺のフーリエ変換をとって $\hat{G}_p(k)$ について解くと，

$$\hat{G}_p(k) = \frac{1}{1-2dp\hat{D}(k)-\hat{\Pi}_p(k)} \qquad (16)$$

が得られる．$d \gg 1$ の場合に定理 3 を (16) から如何に出すかを以下で簡単に紹介する[*7)]．

4.2 節では SRW のレース展開の表式 (10) から s_n や r_n を計算した．SAW の表式 (16) では $\hat{\Pi}_p(k)$ を陽に書き下せないので，4.2 節の議論はそのままの形では使えない．しかし，**タウバー型の解析**により，より緩い条件の下でも c_n, l_n の漸近形を求めることができる：

主張 5 正の定数 p_c, α, β があって，$p\uparrow p_c, |k|\downarrow 0$ のときに以下の漸近形が満たされるとせよ：

$$\hat{G}_p(k) \sim \frac{1}{\alpha|k|^2+\beta(p_c-p)}. \qquad (17)$$

このとき，$c_n \sim (\beta p_c)^{-1}p_c^{-n}$, $l_n \sim \frac{2d\alpha}{\beta p_c}n$ である．

---

*6) ω_1 の終点と ω_2 の始点は同一点 0 だから，自明な交点 0 は常に存在する．ここで「交わる」というのは，終点始点以外の非自明な交点があるということである．

*7) 議論の道筋を明確にするため，以下の「主張」は敢えて不正確な形――特に必要な条件を一部省略――で述べた．正確な定式化は文献 1, 2) などを参照されたい．

従って，定理3の証明には，漸近形(17)を証明すればよい．(17)の証明には以下のように進む．まず，$\hat{G}_p(0) = \sum_n c_n p^n$ かつ $c_n \ge \mu^n$ だから，$p = p_c = 1/\mu$ では(16)の分母がゼロになることに注意する．$1 - 2dp_c\hat{D}(0) - \hat{\Pi}_{p_c}(0) = 0$ を用いて，(16)の分母を以下のように変形する：

$$\{\hat{G}_p(k)\}^{-1} = 2d(p_c - p) + \hat{\Pi}_{p_c}(0) - \hat{\Pi}_p(0) + 2dp\{1 - \hat{D}(k)\} + \hat{\Pi}_p(0) - \hat{\Pi}_p(k).$$

第一行，第二行ともに，第一項はSRWと類似の簡単な項，第二項がSAW特有の Π で書かれた項である．第一項に比べて第二項が小さいことが言えれば，漸近形(17)を証明できるだろう．

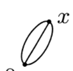
そこで以下では第二項が小さいことを示す．まず

$$\bar{G}_p := \sup_x |x|^2 G_p(x), \quad B_p := \sum_{x\neq 0}\{G_p(x)\}^2$$

を定義する．これらの量が小さいときには Π_p も小さいことが以下の主張からわかる．

主張6　$\max\{\bar{G}_p, B_p\} = \epsilon$ とする．$\epsilon \ll 1$ のとき，$|\hat{\Pi}_p(0) - \hat{\Pi}_p(k)| \le O(\epsilon^2)\{1 - \hat{D}(k)\}$.

（証明のアイディア）　$\Pi_p(0, x)$ の各項を G_p を用いて評価する．例えば，$\Pi_p(0, x)$ の第二項の和は

$\sum_{x\neq 0}$ 

$$\le \sum_{x\neq 0}\{G_p(x)\}^3 \le \sup_{x\neq 0} G_p(x) \times \sum_{x\neq 0}\{G_p(x)\}^2 \le \bar{G}_p B_p \le \epsilon^2.$$

次に，Π_p が小さいときには $\bar{G}_p, B_p$ も小さいことが以下の主張からわかる．

主張7　$0 \le p < p_c$ で主張6の結論を仮定すると，$\max\{\bar{G}_p, B_p\} \le 1/d + O(\epsilon^2)$ が成り立つ．

（証明のアイディア）　$\bar{G}_p$ や B_p は p の増加関数であるから，$p = p_c - 0$ の場合を考えれば十分である．$p = p_c - 0$ において，$\bar{G}_p$ や B_p の表式における $\hat{G}_p(k)$ を対応するSRWの量 $\hat{C}_p$（ただし，$p = \frac{1}{2d}$）で置き換えたものを $\bar{C}, \tilde{B}$ と書こう．主張6の結論は，$\hat{G}_p(k)$ と $\hat{C}_p(k)$ の誤差が小さいことを主張しているので，$\bar{G}_p, B_p$ と $\bar{C}, \tilde{B}$ の差は $O(\epsilon^2)$ であることが言える．一方，$\hat{C}_p(k)$ の具体的表式(10)から $\bar{C}, \tilde{B}$ は $\frac{1}{2d} + O(\frac{1}{d^2})$ であるとわかる．従って，$\bar{G}_p = \bar{C} + O(\epsilon^2) = \frac{1}{2d} + O(\frac{1}{d^2}) + O(\epsilon^2)$ などが結論できる．□

主張6–7から，$d \gg 1$ では任意の $0 < p < p_c$ にて，$\left(\bar{G}_p, B_p \le 4/d\right) \Longrightarrow \left(\bar{G}_p, B_p \le 3/d\right)$ が成り立つことがわかる．これに(1) $\bar{G}_p$ と B_p は $p = 0$ ではゼロであること，(2) $\bar{G}_p$ と B_p は $|p| < p_c$ では p の連続関数であること，を併せて用いると，ゼロから出発した $\bar{G}_p$ と B_p は $p < p_c$ では $3/d$ を越えられず，非常に小さいことが結論できる．つまり，補題6の前提が $\epsilon = O(1/d)$ で成り立つので，漸近形(17)が示される．

6. 最後に

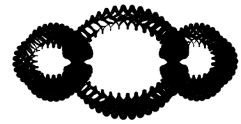
本稿ではSAWの臨界現象，およびその解析に有効なレース展開の手法を紹介した．臨界現象は統計力学の中心的な研究テーマの一つで，広範囲のモデルが臨界現象を示すと考えられているが，厳密な結果は限定的であり，今後の発展が待たれる．高次元での臨界現象の解析にはレース展開の手法が非常に有効であるが，特に高次元のSAW，パーコレーション，lattice animals，コンタクトプロセスなどの確率論的モデルに対しては，ほとんど唯一の有効な解析手段と言える．本稿がこれらの話題に対する読者の関心を引き出すことができれば幸いである．レース展開に関する総説としては文献2)を参照されたい．

参考文献

1) N. Madras and G. Slade. *The Self-Avoiding Walk.* Birkhäuser, (1993).
2) G. Slade. *The Lace Expansion and its Applications.* (Saint-Flour XXXIV$^{\text{th}}$). Lecture Notes in Mathematics #1879. Springer, (2006).
3) D.C. Brydges and T. Spencer. *Commun. Math. Phys.*, **97** (1985) 125–148.
4) G. Slade. *Commun. Math. Phys.*, **110** (1987) 661–683.
5) T. Hara and G. Slade. *Commun. Math. Phys.*, **147** (1992) 101–136.
6) G. Slade. *Ann. Probab.*, **17** (1989) 91–107.

（はら・たかし，九州大学大学院数理学研究院）

ランダム行列
ASEPへの応用



笹本 智弘

1. はじめに

ランダム行列とは，行列要素がランダムである行列のことである[1~4]．行列も確率変数も馴染みの深いものだが，意外とも思えるこれら2つの組合せを考えることにより，全く新しい世界が開かれる．ランダム行列の理論そのものも興味深いものだが，様々な問題に適用されている点も見逃せない．その応用は原子核物理学からリーマンゼータ関数の零点分布にまで及び，以前本誌で特集が組まれたこともある[5]．

その際重要となるのは，考えている問題にランダム行列がどのように現れるかである．例えば乱れのある量子系への応用においては系を記述する演算子（行列）であるハミルトニアンがランダムになっていると考えられるので対応は考えやすい．原子核準位統計への応用においては，ランダムネスのないハミルトニアンをランダム行列で「近似」するという一見不思議なことを行ったりする．

ASEP (asymmetric simple exclusion process, 非対称単純排他過程）は，1次元の格子上を多数の粒子が体積排除の相互作用の下で非対称なランダムウォークをするものである[6,7]（図1）．交通流の簡単な例ともみなせるなど，種々の応用も知られている一方で，理論的にも興味深く，近年多方面からの研究が進んでいる．一見ランダム行列などと縁のなさそうなものであるが，10年ほど前，ASEPのある量の分布関数がランダム行列に現れるものと同じであるということが見出された．

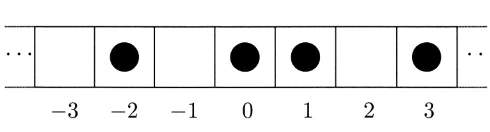


図1　ASEP．各粒子は体積排除相互作用の下，非対称ランダムウォークを行う．

上に挙げた例と比較すると，ASEPにおいてはランダム行列が表には現れていないところが一つの特徴である．一体ASEPとランダム行列にはどのような関係があり，どのように理解することができるのであろうか．

2. ランダムウォークとブラウン運動

まずは1次元格子上に粒子が一つだけいる場合を考えよう．この粒子は，時刻 $t=0$ では原点にいるとする．その後，時刻 t で位置 x にいたとすると，時刻 $t+1$ では確率 $1-q$ で右隣の格子点に移動し，確率 q で同じ格子点に留まるとする．ただし $0<q<1$ とする．本稿ではこれを**ランダムウォーク**と呼ぶ（標準的なランダムウォークは確率1/2で左右の格子点に移動する）．時刻 t で位置 x にいるのは，t 時間ステップのうち，x 回右に移動し，$t-x$ 回同じ場所に留まるときであり，そのような可能性は二項係数を用いて $\binom{t}{x}$ 通りあることを考えると，粒子が時刻 t で位置 x にいる確率 $p(x,t)$ は，

$$p(x,t) = \binom{t}{x}(1-q)^x q^{t-x} \tag{1}$$

で与えられる．これは二項分布である．

時刻 i で粒子が右へ移動するとき $X_i = 1$，同じ格子点に留まるとき $X_i = 0$ となる変数 X_i $(i = 1, 2, \ldots)$ を考えると，時刻 t でのランダムウォークの位置 $X(t)$ は $X(t) = X_1 + \ldots + X_t$ と表すことができる．X_i は独立で各々パラメータ q のベルヌイ分布に従う確率変数である．$\mathbb{P}[A]$ で事象 A が起こる確率を表すことにすると

$$\mathbb{P}[X_i = 1] = 1 - q, \quad \mathbb{P}[X_i = 0] = q. \tag{2}$$

独立確率変数の和に関しては，良く知られているように**中心極限定理**が成り立つ．これは，n 個の独立な確率変数の和において，その平均を差し引いて標準偏差で割ったものを考えると，それは $n \to \infty$ の極限では標準の正規分布に従うというもので，今の場合でいうと

$$\lim_{t\to\infty} \mathbb{P}\left[\frac{X(t) - (1-q)t}{\sqrt{q(1-q)t}} \le s\right] = \int_{-\infty}^{s} \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} dx \tag{3}$$

が成り立つことになる．これはランダムウォークの言葉でいえば，時刻 t が大きい長時間極限を考え，同時に空間方向は $\sqrt{t}$ のスケールで考えることに相当し，この極限でランダムウォークは**ブラウン運動**に収束する．ブラウン運動は時々刻々とその位置が確率的に変化してゆく確率過程である．確率過程で時刻 t を一つ固定すると確率変数となる．例えばブラウン運動の時刻 t での位置 $B(t)$ は確率変数でその確率密度 $p(x,t)$ は

$$p(x,t) = \frac{e^{-x^2/2t}}{\sqrt{2\pi t}} \tag{4}$$

で与えられる．これは平均 0, 分散 t の正規分布であり，次の拡散方程式を満たす：

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x,t). \tag{5}$$

ランダムウォークでは別の極限を考えることもできる．q が 1 に近い，つまり粒子の右への移動があまり起こらないような状況で，右への移動が有限回起こるくらい長い時間待つことにする極限を考えると，1 次元格子上を右へ移動する連続時間確率過程が得られる．この場合時刻 t で位置 x にいる確率 $p(x,t)$ は**小数の法則**より，ポアッソン分布

$$p(x,t) = \frac{t^x}{x!} e^{-t} \tag{6}$$

で与えられる．各粒子に着目すると，指数分布に従う待ち時間だけ待った後，右隣の格子点へ移動するという状況である．ここではこれをポアッソンランダムウォークと呼ぶことにしよう．このポアッソンランダムウォークで長時間の極限を考えると，やはりブラウン運動を得ることができる．

■ 3. 2 種類の壁 ■

今度はブラウン運動で原点に壁がある場合を考えてみよう．ひと口に壁と言っても色々な種類の壁を考えることができるが，まず粒子が壁からの距離に反比例する力を受ける場合を考える．この場合，時刻 t で位置 x に粒子がいる確率密度 $p(x,t)$ に対する方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x,t) + \frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial x} p(x,t) \tag{7}$$

で与えられる．(5) と比較すると，第 2 項が壁からの斥力を表していることが分かる．この場合斥力のため粒子は壁にぶつからないことが知られている．

今度は，粒子が壁で反射される場合を考えよう．斥力があるわけではないので，粒子は難なく壁の所までくることはできるのだが，壁のところまで来るとそれ以上は進めずその場に少し留まり，壁から離れようとする際は障害なくそちらに行けるような状況である．

壁から離れているときの粒子の運動はブラウン運動であるとすると，この過程はブラウン運動 $B(t)$ を用いて

$$Y(t) = B(t) - \min_{0 \le s \le t} B(s) \tag{8}$$

と定義することができる．これを**反射壁ブラウン運動**という[8]．図 2 をじっと眺めると，(8) が原点

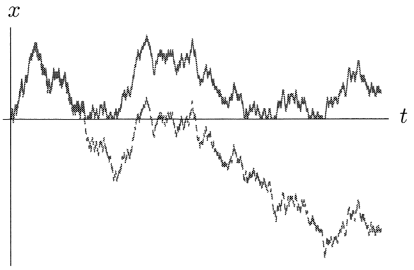


図 2 反射壁ブラウン運動 $Y(t)$. 下側点線はブラウン運動 $B(t)$ を表す.

にある壁で反射されるブラウン運動を表していることが納得できるであろう.

最後に，反射壁ブラウン運動と通常のブラウン運動については

$$\max_{0\le s\le t} B(s) \stackrel{d}{=} Y(t) \tag{9}$$

という等式が成り立っていることが知られている. ただしここで $\stackrel{d}{=}$ は分布において等しいということを表す.

4. ダイソンのブラウン運動

エルミート行列 H は，エルミート共役 $H^* = (\bar{H}_{ji})_{1\le i,j\le N}$ と $H = H^*$ の関係を満たす行列であったことを思い出そう. 従って N 行 N 列のエルミート行列の場合，対角成分 H_{jj} $(j = 1,\dots,N)$, 非対角成分の実部 $\mathrm{Re}H_{jk}$ $(1 \le j < k \le N)$, 虚部 $\mathrm{Im}H_{jk}$ $(1 \le j < k \le N)$, 計 N^2 個独立な成分がある.

これら独立な要素を，独立なブラウン運動としたものを考えることができるが，これが**ダイソンのブラウン運動**である[9]. 行列要素がランダムなのでこれはランダム行列の一種である. 2 節で述べたことから，時刻 t を一つ固定すると，行列要素は独立な正規分布 (4) に従うことになるが，これは**ガウシアン・ユニタリ・アンサンブル** (Gaussian unitary ensemble, GUE) と呼ばれるランダム行列にほかならない.

GUE はランダム行列の中でも特に性質の良いものとして知られており，特にその固有値の統計的な性質について多くのことが知られている. 例えば時刻 t での最大固有値 $X_N(t)$ の分布を計算することができ,

$$\mathbb{P}[X_N(t) \le s] = \frac{1}{Z_N(t)} \int_{(-\infty,s]^N} dx_1 \cdots dx_N \times \prod_{1\le i<j\le N} (x_i - x_j)^2 \prod_{i=1}^{N} e^{-\frac{x_i^2}{2t}} \tag{10}$$

という N 重積分で表すことができる. ただしここで $Z_N(t)$ は規格化定数である.

ダイソンのブラウン運動に対しては，各時刻で行列を対角化することにより，固有値の運動を考えることができる. 確率密度 $p = p(x_1,\dots,x_N,t)$ は次のフォッカー–プランク方程式を満たす：

$$\frac{\partial}{\partial t} p = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x_j^2} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j\ne i} \frac{1}{x_i - x_j} \frac{\partial p}{\partial x_i}. \tag{11}$$

これは N 個の粒子 (固有値) が，粒子間の距離に反比例した斥力相互作用を受けながら，ブラウン運動していると読むことができる. (11) の相互作用項の形は 3 節の斥力壁の場合と似ていることに注意しよう. 斥力相互作用は十分強いので，粒子たちの軌跡が交差することはないことが知られている. ダイソンのブラウン運動の固有値たちの軌跡は，図 3 のようになる.

多数の独立な粒子に非交差の条件を課すことで得られる過程を非交差過程と呼ぶことにすると，ダイソンのブラウン運動はその仲間であり，この事実を用いることにより，多時刻の結合分布など種々の量が計算されている[7,10]. ダイソンのブラウン運動は色々な見方での理解が可能である. 非交差ブラウン運動から h 変換と呼ばれる変換を用いて構成する方法や，最近では独立な複素ブラウン運動を用いた表示が得られたりしている[11].

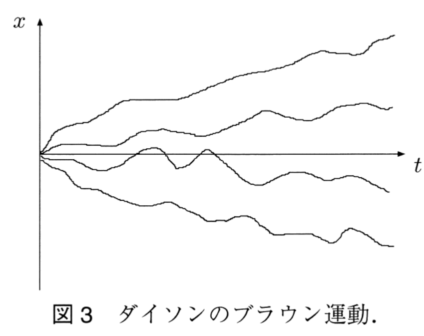


図 3 ダイソンのブラウン運動.

5. TASEP

ASEP において，粒子が一方向のみに移動する特別な場合を TASEP（Totally ASEP）という．TASEP においては，各粒子はポアッソンランダムウォークを行おうとする．ただし右隣の格子点に粒子がいる場合は，移動することができない．この時間発展ルールから考えて，TASEP の粒子たちの軌跡も交差することがない．その点はダイソンのブラウン運動の場合と同じなので一瞬 TASEP は非交差ウォークの仲間であると思うかも知れないが，粒子間の相互作用の性質はかなり異なるものになっていることに注意しよう．

ここでは図 4 にあるような特別な初期条件のみを考えることにする（ステップ初期条件）．この初期条件から TASEP のダイナミクスをスタートすると，まず最初に起こるのは，1 番目の粒子が右隣の格子点 1 に移動することであり，次に起こるのは，1 番目の粒子が格子点 2 に移動するか，2 番目の粒子が格子点 0 に移動するかである．以後順次同様な時間発展を続けていくと，時刻 t には例えば図 1 のような状況になる．

$N(t)$ を時刻 t までに，格子点 0 から格子点 1 へ移動した粒子の個数とし，また右から N 番目の粒子の時刻 t での位置を $X_N(t)$ とすると，次の公式が成り立つ：

$$\mathbb{P}[N(t) \geq N] = \frac{1}{Z_N} \int_{[0,t]^N} dx_1 \cdots dx_N \times \prod_{1 \leq j < k \leq N} (x_j - x_k)^2 \prod_{j=1}^{N} e^{-x_j}. \tag{12}$$

これを (10) と比較すると，2 つの式の右辺は大変似ていることがわかる．(10) の正規分布の確率密度関数 e^{-x^2} を，指数分布の確率密度関数 e^{-x} で置き換えたものが (12) といえる．(12) そのものが表れるランダム行列も知られている[1)]．(12) の導出について述べる余裕はないが，組合せ論に持ち込む方法や TASEP の遷移確率を用いる方法がある．

これがランダム行列理論と TASEP の明示的な関係である．少なくともこれまでのところ TASEP の中にランダム行列が見つかったというわけではないが，ランダム行列理論に現れる量が TASEP の量の記述にも現れるということなのである．それでその後の解析には十分で，実際上記の表式を用いると，$t \to \infty$ の解析も比較的容易に実行することができる．しかしこの関係は不思議な気もする．上でも述べたように，ダイソンのブラウン運動の粒子（固有値）たちと TASEP の粒子たちの相互作用の性質はかなり異なったものであるのに，同じ形の表式が現れているという点である．よりすっきりと両者の関係を理解する方法はないものであろうか．

1 節で見たように，ポアッソンランダムウォークで長時間の振舞いを考えると，ブラウン運動を得ることができるのであった．同じ極限で TASEP はどうなるであろうか．各粒子は，基本的にはブラウン運動になるが，粒子間の相互作用がどうなるかが問題である．j 番目の粒子は，$j+1$ 番目の粒子に対して反射壁の役割を果たすようになると考えられる．つまり 1 番目の粒子は通常のブラウン運動であり，2 番目の粒子はやはりブラウン運動なのであるが，1 番目の粒子にぶつかると反射されてしまう．また 3 番目の粒子もブラウン運動なのであるが，2 番目の粒子にぶつかると反射され，以下同様である．ここではこの過程のことを Z 過程と呼ぶことにする（図 5）．TASEP の拡散極限版であり，粒子間の相互作用は反射壁型となっている．

この Z 過程の N 番目の粒子の位置 $X_N(t)$ に

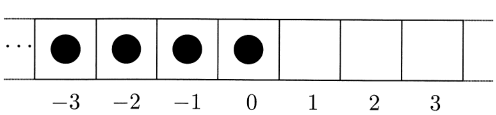


図 4　ステップ初期条件．

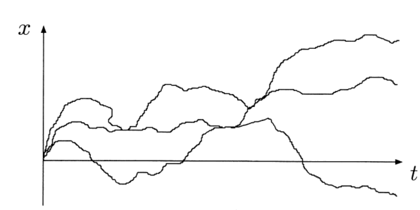


図 5　Z 過程．

関して，(10) が成り立つ．これは，TASEP に対する同様な式（(12) と類似の $X_N(t)$ に対する式）で拡散極限を取って得ることもできるし，Z 過程に関する遷移確率を用いて示すこともできる．いずれにせよ，TASEP とほぼ同じ粒子間相互作用を持つ過程における粒子の位置の分布が，GUE ランダム行列の最大固有値分布と正確に一致しているわけである．ダイソンのブラウン運動と Z 過程はやはり違うものであるが，同じ分布が現れているということになる．実はダイソンのブラウン運動と Z 過程には深い関係がある．以下それについて述べる．

■ 6. 織り交ぜ ■

これまでは，ダイソンのブラウン運動にしろ Z 過程にしろ粒子数は固定して考えていた．実は，n 粒子のダイソンのブラウン運動から $n+1$ 粒子のダイソンのブラウン運動を作ることができる．まず n 粒子のダイソンのブラウン運動を用意し，これを W と呼ぼう．次に $n+1$ 粒子系 X を，W と織り交ざる（英語では interlace する）ように作る．つまり

$$X_1 \le W_1 \le X_2 \le \ldots \le W_n \le X_{n+1} \qquad (13)$$

を満たすようにする．ここで織り交ぜ (13) は，X 粒子が W 粒子に反射されることにより維持されるものとする．つまり，例えば図 6 の $n=3$ の例で言うと，X_1 は W_1 で反射され，X_2 は W_2 と W_3 で反射され，X_3 は W_3 と W_4 で反射され，X_4 は W_3 で反射されるとするのである．

さてここで W のことを忘れ，$n+1$ 粒子系 X に着目してみよう．上の構成では，X 粒子は W 粒子に反射されながら運動していたのであるが，W 粒子を見ないことにすると，X 粒子が何らかの相互作用をしながら運動している系になっている．そして実はこれが $n+1$ 粒子のダイソンのブラウン運動になっていることを示すことができるのである[12]．この事実を見ることもそれほど難しくはなく，例えば W と X を合わせた $2n+1$ 粒子系の遷移確率を，W の自由度に付いて積分したものが，$n+1$ 粒子系に対する (11) を満たすことを計算で確認することができる．

さらにこの手続きは何度も繰り返すことができる．$n=1$ から $n=N$ まで繰り返すと，全体で $N(N+1)/2$ 粒子いる大きな系の確率過程が得られる．$n=k$ 粒子のうち $i, 1 \le i \le k$ 番目の粒子の位置を $x_i^k, 1 \le i \le k \le N$ と表すことにすると，これらは

$$x_i^{k+1} \le x_i^k \le x_{i+1}^{k+1} \qquad (14)$$

という条件を満たしている（図 7）．これは**ゲルファント−ツェトリン錐**として知られ，表現論などにおいて重要な役割を果たしている．

さてこれで一番下の N 行目の N 粒子たちに着

$$\begin{array}{ccccccc} & & & x_1^1 & & & \\ & & x_1^2 & & x_2^2 & & \\ & x_1^3 & & x_2^3 & & x_3^3 & \\ \cdot^{\cdot^{\cdot}} & & & \vdots & & & \ddots \\ x_1^N \;\; x_2^N \;\; x_3^N & & & \cdots & & & x_{N-1}^N \;\; x_N^N \end{array}$$

図 7　ゲルファント−ツェトリン錐．

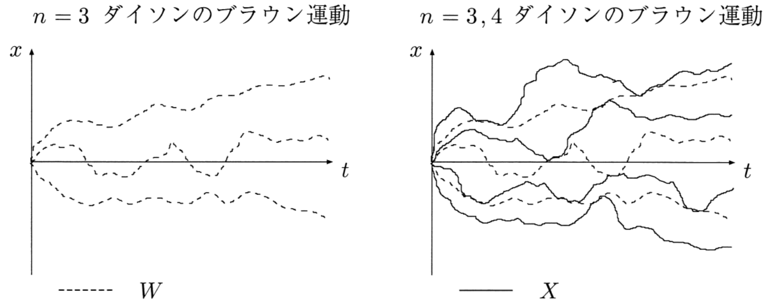


図 6　織り交ぜの例．

目すると，これは N 粒子のダイソンのブラウン運動である．一方右上の列の N 粒子 $x_i^i, 1 \le i \le N$ を見ると，x_1^1 はブラウン運動であり，x_2^2 は x_1^1 で反射され，x_3^3 は x_2^2 で反射され … という条件になっているが，これは前節で TASEP の拡散極限として得られた Z 過程に他ならないことがわかる．ここで図の右下にいる粒子 x_N^N は N 粒子のダイソンのブラウン運動と N 粒子の Z 過程，両方に共通の粒子として含まれていることに注意しよう．よって，ダイソンのブラウン運動で最大固有値の分布と，Z 過程で N 番目の粒子の分布というのは必然的に等しいものであるということになる．

ここでは簡単のため各粒子がブラウン運動を行う Z 過程について話を進めたが，同様な考察を TASEP に対しても行うことが可能であり，ASEP とランダム行列理論を結ぶ公式 (12) を自然に理解することができることが分かった．

7. 関連する話題

ダイソンのブラウン運動の固有値の運動において，壁のある場合を考えることも可能である．3 節の場合と同様に壁は 2 通り考えることができ，一つは斥力がある場合で C 型ダイソンのブラウン運動，もう一つは反射壁の場合で D 型ダイソンのブラウン運動と呼ばれるものに対応している[10]．これらに対しても，6 節の構成を行うことが可能で，この場合は**シンプレクティック ゲルファント–ツェトリン錐**と呼ばれるものが登場する．C 型または D 型のダイソンのブラウン運動の最大固有値の分布が，壁あり Z 過程の N 番目の粒子の位置の分布と等しいことが直ちにわかる．さらに 3 節で述べた反射ありブラウン運動と通常のブラウン運動の関係 (9) を，壁ありダイソンのブラウン運動の場合に拡張することもできる[13]．

8. おわりに

以上，ASEP とランダム行列理論の関係を説明してきた．ASEP においてランダム行列そのものは現れていないことを考えると，ランダム行列理論はランダム行列以外の対象へも応用可能な汎用性の高い理論であると言えよう．

さて ASEP とランダム行列の関係がこのように間接的なものであることから，もしかすると読者の中には，ここで議論された内容は特殊なモデルについてのみ有効であるのではないかと思った方がいるかもしれない．しかしこの対応の普遍性は大変強いものであり，実際最近，ランダム行列理論に現れる分布が液晶乱流を用いた界面成長の実験において綺麗に観測されたりしている[14]．

理論的には最近は TASEP のみならず粒子が両方向に移動できる ASEP の場合にも揺らぎの研究が進展しており，その数理的な構造を理解することが次の大きな課題である．

最後に原稿を丁寧に読んで下さった今村卓史氏を始め，本稿の内容に関して議論の相手になって頂いた方々に感謝致します．

参考文献

1) 永尾太郎，『ランダム行列の基礎』，東京大学出版会，2005.
2) M.L. Mehta, *Random matrices*, 3rd ed., Elsevier, 2004.
3) P.J. Forrester, *Log gases and random matrices*, Princeton University Press, 2010.
4) G. Akemann, J. Baik and P. Di Franscesco (編), *Handbook of random matrix theory*, Oxford University Press, 2011 出版予定.
5) 数理科学 2007 年 2 月号特集「ランダム行列の広がり—その多彩な応用—」.
6) 笹本智弘，物性研究 2003 年 3 月号.
7) 鈴木淳史，『現代物理数学への招待』，サイエンス社，2006.
8) 例えば，舟木直久，『確率微分方程式』，岩波書店，2005.
9) F.J. Dyson, J. Math. Phys **3** (1962), 1191–1198.
10) 香取眞理，種村秀紀，「非衝突過程・行列値過程・行列式過程」，数学，**61** No.3 (2009), 225–247.
11) M. Katori and T. Tanemura, arXiv:1008.2821.
12) J. Warren, *E.J. Prob.* **12** (2007), 573–590.
13) A. Borodin, P.L. Ferrari, M. Prähofer, T. Sasamoto, J. Warren, *E. Comm. Prob.* **14** (2009), 486–494.
14) K.A. Takeuchi, M. Sano, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 230601 (2010).

（ささもと・ともひろ，千葉大学大学院理学研究科）

可積分系とベーテ仮説



堺　和光

1. はじめに

太陽系の惑星のように，相互作用しあう物体の運動は，運動方程式，つまり微分方程式で表される．2体問題，例えば，太陽と地球のみを考えた場合，これらの運動は，運動方程式を積分することで厳密に計算される．ところが，これに火星や木星など他の惑星が加わった3体以上の問題になると，運動方程式の積分は一般に不可能になり，惑星の運動を厳密に求めることはできなくなる．この例のように，相互作用する多数の物体の運動を解析的に求めることは非常に困難な問題なのである．

ところが，もし，エネルギーや運動量といった独立な保存量が，系の自由度の数だけ存在し，それらが包合的ならば，運動方程式は積分可能となることが知られている[1)]．このような系は**可積分系**と呼ばれ，独立な保存量を用いて，系の運動を解析的に求めることが原理的に可能となる．

さて，本稿の舞台となるミクロな世界，つまり量子力学の世界へと話を移そう．ミクロな世界では，系のエネルギーや運動量といった物理量は演算子で表される．観測される物理量やそのときの状態は，対応する演算子の固有値問題を解く（演算子を対角化する）ことで求めることができる．例えば，エネルギーはハミルトニアンと呼ばれる演算子で表され，観測されるエネルギーとそれに対応する状態は，シュレーディンガー方程式と呼ばれる固有値問題の固有値と固有関数でそれぞれ与えられる．しかしながら，系の自由度が大きな多体系の場合，量子系のハミルトニアンを対角化することは，古典多体系の運動方程式を積分する場合と同様，非常に難しい問題である．

量子系のハミルトニアンを $\mathscr{H}$ と書こう．量子力学では，物理量 $\mathscr{A}(t)$（t：時間）の時間発展は，

$$i\frac{d\mathscr{A}(t)}{dt} = [\mathscr{A}(t), \mathscr{H}] = \mathscr{A}(t)\mathscr{H} - \mathscr{H}\mathscr{A}(t)$$

で決定される．このとき，$\mathscr{A}(t)$ が $\mathscr{H}$ と可換，すなわち $[\mathscr{A}(t), \mathscr{H}] = 0$ であれば，$\mathscr{A}(t)$ は時間変化せず，従って保存量となる[*1)]．さて，これらの保存量をうまく用いて，シュレーディンガー方程式を厳密に解くことができるだろうか？ 残念ながら話はそれほど単純ではない．量子系では，保存量の果たす役割は古典系ほど明確ではなく，量子多体系のハミルトニアンを対角化する統一的な原理は，今のところ発見されていない．

一方，空間1次元の場合，量子多体系の中には，ハミルトニアンを厳密にしかも系統的に対角化できる系の存在が数多く知られている．これらの系は，一般に高い対称性をもち，また，十分に多くの「非自明」な保存量が具体的に構成され得るという共通の性質を有している．ここでは，このような性質を有する系を，**量子可積分系**と呼ぶこと

*1） 保存量自体はいくらでも作られる．例：$\mathscr{A} = \sum_j c_j \mathscr{H}^j$．また，$\mathscr{H}$ の固有値 $E_1, \ldots, E_N$ が縮退しないような系では，固有値 $a_1, \ldots, a_N$ をもつような保存量 $\mathscr{A}$ は，$\mathscr{A} = \sum_{j=1}^N a_j \prod_{k\neq j}^N \frac{\mathscr{H}-E_k}{E_j-E_k}$ のように $\mathscr{H}$ の冪で表される．

にしよう[2~8]．

本稿でこれから紹介する**ベーテ仮説**とは，これら量子多体系を厳密に解く手段として最も有名な方法の一つである[3~8]．元々ベーテ仮説は，ある磁性体模型の研究から生まれたものだが，可積分性自体は分野横断的に現れる概念である．このことに対応して，例えば，冷却原子気体の理論，ASEP[9]と呼ばれる非平衡統計力学系，さらには，超弦理論においてホットトピックの一つである AdS/CFT 対応[10]など，意外な場面でベーテ仮説に出くわすことも珍しくはない．そこでは，可積分系の研究で培われてきた概念や方法が活躍するさまを目の当たりにすることができる．

さて，前置きはこの辺にして，ベーテ仮説とはどのようなものであるのか見てみよう．その発見者であるベーテ（H.A. Bethe）が，磁性体の模型である**ハイゼンベルク模型**の厳密解を発表したのは，彼がローマに滞在中の 1931 年春，今から 80 年も前のことである[11]．

2. ベーテ仮説とは

ハイゼンベルク模型とは，量子磁性現象を記述するための典型的な模型であり，空間 1 次元の場合，以下のハミルトニアンで表される：

$$\mathscr{H} = \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{L}(\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y\sigma_{j+1}^y + \sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - 1). \tag{1}$$

ここで，σ_j^α $(\alpha = x, y, z)$ は j 番目のスピン空間，つまり 2 つの基底 $|+\rangle_j = \binom{1}{0}_j$, $|-\rangle_j = \binom{0}{1}_j$ で張られる 2 次元空間 $V_j = \mathbb{C}|+\rangle_j \oplus \mathbb{C}|-\rangle_j$ に作用するスピン 1/2 のパウリ行列 σ^α である：

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

すなわち $\mathscr{H}$ は 2^L 次元の空間に作用する $2^L \times 2^L$ の行列で表される．また，この系には周期境界条件 $\sigma_{j+L}^\alpha = \sigma_j^\alpha$ が課されているとしよう．

この模型の固有値・固有状態を厳密に求める方法が以下に述べるベーテ仮説である．まず，すべてのスピンが上向きに揃った状態 $|+\cdots+\rangle = |+\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |+\rangle_L$ を「真空」と見なし $|0\rangle$ と書こう．これは $\mathscr{H}$ の固有状態であり，そのエネルギー固有値は 0 である．この状態から $x_1, \ldots, x_m$ 番目のスピンを下向きにした状態を $|x_1x_2\cdots x_m\rangle$ と書く*2)．この下向きスピンを，真空中に生成された「粒子」と見なせば直観的に考えやすい．この状態を重ね合わせて，$\mathscr{H}$ の固有状態を

$$|\Psi_m\rangle = \sum_{1\le x_1<\cdots<x_m\le L} \psi(x_1,\ldots,x_m)|x_1\cdots x_m\rangle$$

と構成しよう．目標はシュレーディンガー方程式

$$\begin{aligned}\mathcal{H}\psi(x_1,\ldots,x_m) &:= \langle x_1\cdots x_m|\mathscr{H}|\Psi_m\rangle \\ &= E\psi(x_1,\cdots,x_m) \end{aligned} \tag{2}$$

の固有関数 $\psi(x_1,\ldots,x_m)$ および，エネルギー固有値 E を具体的に計算することである．

最初に 1 粒子状態（$m = 1$）を考えよう．この問題は，1 次元リング状を運動する自由粒子の問題と等価である．系の並進対称性（空間座標を $j \to j + l$ と一斉に変えても $\mathscr{H}$ は不変）を考えれば，波動関数は平面波 $\psi(x) = e^{ikx}$ で与えられるであろう．このことは，(2) から直ちに確かめられる*3)：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}\psi(x) &= \frac{1}{2}[\psi(x+1) + \psi(x-1)] - \psi(x) \\ &= E(k)\psi(x); \quad E(k) = \cos k - 1.\end{aligned}$$

この粒子の運動量 k は，周期境界条件 $\psi(x+L) = \psi(x)$ から，$k = 2\pi I/L$ $(I = 0, 1, \ldots, L-1)$ と求められる．

2 粒子状態（$m = 2$）の場合は，散乱による効果を正しく取り入れなければならない．相互作用が遠方で十分早くゼロになる場合，粒子間距離が十分離れた漸近領域では，これらの粒子は自由粒子として扱える．散乱前の 2 粒子の運動量をそれぞれ k_1, k_2 とし，散乱後の運動量を k_1', k_2' とする．エネル

*2) 例えば，$L = 5$ のとき，$|125\rangle = |--++-\rangle = \binom{0}{1} \otimes \binom{0}{1} \otimes \binom{1}{0} \otimes \binom{1}{0} \otimes \binom{0}{1}$．

*3) $\sigma_j^\pm = (\sigma_j^x \pm i\sigma_j^y)/2$ で定義される $\sigma_j^\pm$ は j 番目の格子上の粒子の生成消滅演算子（$\sigma_j^+|0\rangle = |j\rangle$, $\sigma_j^-|j\rangle = |0\rangle$）である．これを用いて $\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y\sigma_{j+1}^y = 2(\sigma_j^+\sigma_{j+1}^- + \sigma_{j+1}^+\sigma_j^-)$ とすれば計算しやすくなる．

ギー保存則 $E(k_1)+E(k_2)=E(k_1')+E(k_2')$ および運動量保存則 $k_1+k_2=k_1'+k_2'$ により，漸近領域における粒子の運動量は $(k_1',k_2')=(k_1,k_2)$（散乱なし）および $(k_1',k_2')=(k_2,k_1)$（散乱あり）の 2 通りに制限される．このことから，$x_1 \ll x_2$ での 2 粒子波動関数は

$$\psi(x_1,x_2)=A_{12}e^{i(k_1x_1+k_2x_2)}+A_{21}e^{i(k_2x_1+k_1x_2)}$$

と書くことができる．ハイゼンベルク模型では，粒子が相互作用するのは互いに最近接に位置するときのみであり，実際，$x_1+1<x_2$ において上の $\psi(x_1,x_2)$ が無条件に固有関数となっていることは

$$\begin{aligned}\mathcal{H}\psi(x_1,x_2) &= \frac{1}{2}[\psi(x_1-1,x_2)+\psi(x_1+1,x_2)\\ &\quad+\psi(x_1,x_2-1)+\psi(x_1,x_2+1)]-2\psi(x_1,x_2)\\ &= (E(k_1)+E(k_2))\psi(x_1,x_2) \quad (3)\end{aligned}$$

から確かめられる．ベーテの第一のアイデアは $\psi(x_1,x_2)$ が近接点 $x_1+1=x_2$ においても固有関数となっていると仮定することである：

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}[\psi(x_1-1,x_2)+\psi(x_1,x_2+1)]-\psi(x_1,x_2)\\ &=(E(k_1)+E(k_2))\psi(x_1,x_2). \qquad (4)\end{aligned}$$

これが成立するためには，(3) において $x_1+1=x_2$ としたものから，(4) を差し引いたものがゼロとなっていなければならない：

$$\frac{1}{2}[\psi(x_1,x_1)+\psi(x_1+1,x_1+1)]-\psi(x_1,x_1+1)=0.$$

これを波動関数の接続条件と呼ぶことにする．この条件から 2 体散乱行列 $S_{12}(k_1,k_2)=A_{21}/A_{12}$（図 1）が

$$S_{12}(k_1,k_2)=-\frac{e^{i(k_1+k_2)}-2e^{ik_2}+1}{e^{i(k_1+k_2)}-2e^{ik_1}+1} \quad (5)$$

と決定される．さらに，周期境界条件 $\psi(x_1,x_2)=\psi(x_2,x_1+L)$ より，k_1, k_2 は方程式

$$e^{ik_1L}=S_{21}(k_2,k_1), \quad e^{ik_2L}=S_{12}(k_1,k_2)$$

の解で与えられる．これで，2 体問題は完全に解けた．

目標の n 粒子状態（$m=n$）を考えよう．2 体問題の場合と異なり，3 体以上の場合，一般に

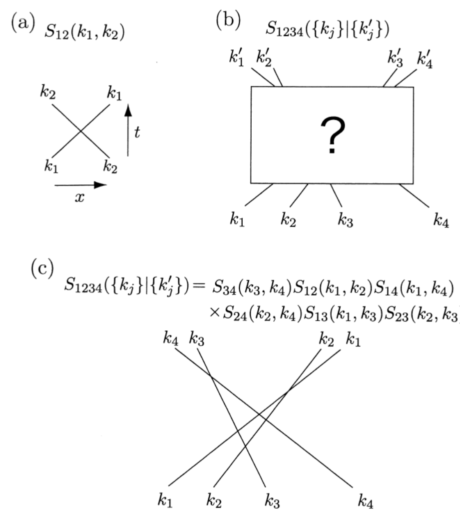


図 1　(a) 2 体散乱行列．(b) 一般の 4 体散乱行列．(c) 因子化された 4 体散乱行列．

散乱後の粒子の取り得る運動量の組 $\{k_j'\}$ は散乱前の個々の粒子のもつ運動量の組 $\{k_j\}$ とは一致しない．エネルギー保存則と運動量保存則の 2 個の保存則のみでは，個々の粒子の取り得る運動量に対して，2 体問題の場合ほど強い制約を課すことはできないからである．にも関わらず，ベーテはひるまずに大胆な仮定を置いた．すなわち，散乱後の運動量 $(k_1',\ldots,k_n')$ は，2 体問題と同様に，$(k_1,\ldots,k_n)$ の単純な並び替えで表されるとし，波動関数として次の形を仮定した（**ベーテ仮説**）：

$$\psi(x_1,\ldots,x_n)=\sum_{P\in\mathfrak{S}_n}A_P\exp\left[i\sum_{j=1}^{n}x_jk_{Pj}\right]. \quad (6)$$

ここで，$\mathfrak{S}_n$ は n 次対称群であり，その要素 P は 1 から n までの添字の置換操作を表す．$x_j+1<x_{j+1}$ のとき，(6) が固有関数になっていることは 2 粒子状態の場合と同様であり，エネルギー固有値は $E=\sum_{j=1}^{n}E(k_j)$ である．さらに，波動関数の接続条件から，散乱振幅は 2 体散乱行列 (5) を用いて $A_{P'}/A_P=S_{P'jP'(j+1)}(k_{P'j},k_{P'(j+1)})$ と表される．ここで，ある一つの j に対して $P'j=P(j+1)$, $P'(j+1)=Pj$ であり，k $(1\le k\le n,$

$k \neq j, j+1$) に対して $P'k = Pk$ である*4).

この結果は，この模型の任意の多体散乱行列は2体散乱行列の積に分解される（**散乱行列の因子化**）という極めて著しい帰結をもたらす．つまり，一般的には求めることが非常に困難な n 体散乱行列は，この模型では $n(n-1)/2$ 個の2体散乱行列の積に因子化されてしまうのである（図1）．この事実と，周期境界条件 $\psi(x_1, \ldots, x_n) = \psi(x_2, \ldots, x_1 + L)$ によって，$\{k_j\}$ は**ベーテ仮説方程式**

$$e^{ik_jL} = \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^{n} S_{lj}(k_l, k_j) \tag{7}$$

の解で与えられる．これで任意の n 粒子状態も解けた．つまり，$\mathscr{H}$ の対角化問題が方程式 (7) の求解問題に帰着されたのである．相互作用の効果は $\{k_j\}$ に組み込まれ，もはやそれらは $2\pi/L$ の整数倍ではない．

3. なぜ解けた？

なぜこの模型を解くことができたのか考えてみよう．振り返ってみると，ハイゼンベルク模型の大きな特性の一つは，散乱の前後で運動量の組 $\{k_j\}$ が変化しないことである．これによって，漸近領域においては，波動関数は (6) のような**非回折的な平面波**で表されるのであった．さらに，相互作用の到達範囲が最近接（デルタ関数的）であることから，(6) を任意の粒子間距離での固有関数とすることができたのである．ハイゼンベルク模型以外でも，ベーテ仮説で解ける量子系は，これら2つの条件を満たしている．さて，波動関数が非回折的な平面波で表されるための十分条件が散乱行列の因子化である．この因子化が無矛盾に成立しているためには，2体散乱を繰り返して得られる最終的な状態（図1(c)）が，それぞれの2体散乱の順序に依存せずに成立している必要がある．

それを保証する関係式が，**ヤン・バクスター方程式**

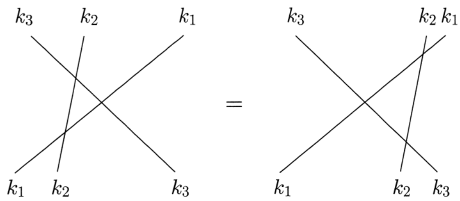


図2 ヤン・バクスター方程式．各粒子の描く軌跡（世界線）を平行移動させて散乱の順序を変えても得られる散乱振幅は等しい．

$$S_{23}(k_2,k_3)S_{13}(k_1,k_3)S_{12}(k_1,k_2)$$
$$= S_{12}(k_1,k_2)S_{13}(k_1,k_3)S_{23}(k_2,k_3)$$

である（図2）．実際 (5) はこれを自明に満たす．この方程式は，その名が示すように，ヤン（C.N. Yang）によってスピン自由度を持つフェルミオン系の可解性の研究において発見されたもので[12]，内部自由度の存在する量子系では特に重要な役割を果たす．また，後述するようにバクスター（R.J. Baxter）によって，あるクラスの可解統計力学模型の統計重率が同様の関係式を満たすことが発見され[13]，現在ヤン・バクスター方程式は量子可積分系を紐解く重要な鍵として認識されている．

それでは，多体散乱行列が因子化される根源は何であろうか？ 前節でも述べたように，エネルギー保存則や，運動量保存則の2個の保存則のみでは，散乱行列にこれほど強い制約を課すことはできない．ベーテ仮説で解ける系には，何か非自明な保存量が内在していると考えるのが自然である．脚注1で述べたように，量子系の保存量自体はいくらでも作ることができる．しかし，ハミルトニアンや運動量演算子の冪，またそれらの積で表されるような自明な保存量は，一般に局所的な演算子の和で表すことはできず，それらは個々の運動量に対して，エネルギー保存則や運動量保存則がもたらす以上の制約を課すことはできない．ハミルトニアンや運動量演算子とは「独立」な新たな保存量の存在が期待されるのである．

残念ながら，ここまでに述べた枠組みでは非自明な保存量を系統的に構成することは難しい．これが可能となったのは，2次元の統計力学模型に

---

*4) 例として，$L = 4$, $(P1, P2, P3, P4) = (3, 2, 4, 1)$, $(P'1, P'2, P'3, P'4) = (3, 4, 2, 1)$ の場合，$A_{P'}/A_P = S_{42}(k_4, k_2)$ である．

おける可解性の研究の進展と，古典可積分系における逆散乱法の量子系への拡張である**量子逆散乱法**の発見によって，量子可積分系の理解が急速に深まり始める 1980 年前後になってからである[6]．

4. 代数的ベーテ仮説

一般に，空間 d 次元の量子系は，$d+1$ 次元の古典統計力学模型にマップできることが知られており，ハイゼンベルク模型に対応する 2 次元古典系が **6 頂点模型**である．以下で見るように，この模型には任意パラメター $v \in \mathbb{C}$ を付加することができ，ハイゼンベルク模型のハミルトニアンは 6 頂点模型の転送行列 $T(v)$ の特殊値で与えられる．6 頂点模型はこのパラメターの自由度の分だけ数理構造が豊かであり，その構造の研究によって，量子可積分系に対するより深い知見が得られてきた．ここで取り上げる，**代数的ベーテ仮説**は数多あるその産物のうち根幹をなすものである．その枠組みの中で重要な役割を果たす**モノドロミー行列**は古典ソリトン理論における逆散乱法に現れるモノドロミー行列の「量子化」と捉えることができ，そのため代数的ベーテ仮説法は量子逆散乱法とも呼ばれる．

さて，6 頂点模型とは，2 次元の周期的格子 ($N \times L$) 上の各格子点の周りの 4 つのエッジに，$+$ および $-$ の 2 つの状態変数が配置された模型であり（図 3），非零となる統計重率 $R_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(v)$ は

$$R_{\pm\pm}^{\pm\pm}(v) = 1, \quad R_{\pm\mp}^{\pm\mp}(v) = \frac{v}{v+2},$$
$$R_{\pm\mp}^{\mp\pm}(v) = \frac{2}{v+2}$$

の 6 つで与えられる．ここで v はスペクトルパラメターと呼ばれる．これらの統計重率を行列要素とする行列 R を以下のように定義しよう：

$$R_{ij}(v)|\alpha\rangle_i \otimes |\beta\rangle_j = \sum_{\gamma,\delta\in\{+,-\}} R_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(v)|\gamma\rangle_i \otimes |\delta\rangle_j.$$

すなわち，$R_{ij}(v)$ は空間 $V_i \otimes V_j$（V_j の定義は 2 節を参照）に作用する 4×4 の行列である．この R 行列は (1) で与えられる $\mathscr{H}$ と

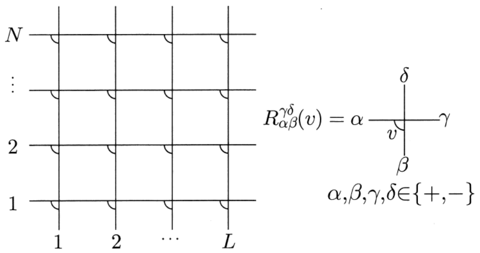


図3 6頂点模型．$N \times L$ の2次元周期格子上の各格子点の周りの4つのエッジに $+$ と $-$ の状態変数が配置される．

$$
\begin{aligned}
&P_{j+1j}R'_{jj+1}(0)\\
&= \frac{1}{4}(\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y\sigma_{j+1}^y + \sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - 1)
\end{aligned}
$$

の関係で結ばれている．ただし $P_{jj+1} = P_{j+1j} = R_{jj+1}(0)$ は置換演算子である．問題を紐解く重要な鍵は，この R 行列がヤン・バクスター方程式

$$
\begin{aligned}
&R_{23}(v)R_{13}(u)R_{12}(u-v)\\
&= R_{12}(u-v)R_{13}(u)R_{23}(v)
\end{aligned}
$$

を満たすことである．すなわち，この方程式の成立によって，6頂点模型の転送行列

$$T(v) = \mathrm{tr}_a\,\mathcal{T}_a(v) = \mathrm{tr}_a\,[R_{aL}(v)\cdots R_{a1}(v)]$$

が，異なるパラメターに関して可換（$[T(u), T(v)] = 0$）となることが保証されるのである．ここで $\mathcal{T}_a(v)$ はモノドロミー行列と呼ばれ $V_a \otimes V^{\otimes L}$ に作用する $2^{L+1} \times 2^{L+1}$ の行列であり，$T(v)$ の対角化に本質的な役割を果たす．また，トレースをとる2次元空間 V_a は補助空間と呼ばれ，一方，$V^{\otimes L}$ は $\mathscr{H}$ が作用する空間と同一であり量子空間と呼ばれる．こうして定義された $T(v)$ によって，量子系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ が

$$\frac{\partial}{\partial v}\log T(v)\Big|_{v=0} = T^{-1}(0)T'(v)\Big|_{v=0} = \mathscr{H} \quad (8)$$

と表される．これは $T(v)$ の可換性および，$T(0)$ が量子空間のスピンの状態を一斉に右に一つだけずらすシフト演算子となることから導出される（図を描くとわかりやすい）[14]．この関係式と転送行列の可換性から，$\mathscr{H}$ は $T(v)$ と交換する．つまり，$T(v)$ はハイゼンベルク模型の非自明な保存量の母関数となっていることを意味する．すなわち，

$$\mathcal{I}_n = \frac{\partial^n}{\partial v^n}\log T(v)\Big|_{v=0}$$

によって，包合的（$[\mathcal{I}_j, \mathcal{I}_k] = 0\ (j \neq k)$）な保存量の組 $\mathcal{I}_n$ が具体的に生成されるのである！ 特に $T(0)$ がシフト演算子であることから，$\mathcal{I}_0$ は全運動量 P に相当し（$\mathcal{I}_0 = iP$），また $\mathcal{I}_1$ はハミルトニアン自身である．

さて，ヤン・バクスター方程式は，モノドロミー行列の行列要素間の代数関係を定める：

$$\mathcal{T}_2(v)\mathcal{T}_1(u)R_{12}(u-v) = R_{12}(u-v)\mathcal{T}_1(u)\mathcal{T}_2(v). \quad (9)$$

この代数関係式を用いることによって，転送行列 $T(v)$ を対角化する手続きが代数的ベーテ仮説である．モノドロミー行列の行列要素をあらわに書き下そう．

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{T}_a(v) = \begin{pmatrix} \mathcal{T}_+^+(v) & \mathcal{T}_-^+(v) \\ \mathcal{T}_+^-(v) & \mathcal{T}_-^-(v) \end{pmatrix}_a = \begin{pmatrix} \mathcal{A}(v) & \mathcal{B}(v) \\ \mathcal{C}(v) & \mathcal{D}(v) \end{pmatrix}_a,\\
&T(v) = \mathrm{tr}_a\,\mathcal{T}_a(v) = \mathcal{A}(v) + \mathcal{D}(v).
\end{aligned}
$$

ここで $\mathcal{T}_\alpha^\beta(v)$ $(\alpha, \beta \in \{+,-\})$ は，${}_a\langle\beta|\mathcal{T}_a(v)|\alpha\rangle_a$ を表し，$\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \mathcal{D}$ はそれぞれ量子空間 $V^{\otimes L}$ に作用する演算子である．真空状態 $|0\rangle = |+\cdots+\rangle$ が $T(v)$ の固有状態となることは統計重率の定義から明らかである：$T(v)|0\rangle = (1 + b(v)^L)|0\rangle$ $(b(v) = R_{\pm\mp}^{\pm\mp}(v) = v/(v+2))$．さて，演算子 $\mathcal{B}(v)$ が粒子（下向きスピン）の生成演算子であることは，真空状態に $\mathcal{B}(v)$ を作用させてみれば確かめられる．これを繰り返せば，n 粒子状態が $|\Psi_n\rangle = \prod_{j=1}^n \mathcal{B}(v_j)|0\rangle$ と構成される．この $|\Psi_n\rangle$ が $T(v)$ の固有状態になっていると仮定しよう．この状態に $T(v)$ を作用させ，(9) から導き出される $\mathcal{A}$, $\mathcal{D}$ と $\mathcal{B}$ の間の代数関係式を用いて，実際に $|\Psi_n\rangle$ が矛盾なく固有関数となるように $\{v_j\}$ の条件を求めるというのが筋書きである．結果，転送行列の固有値は

$$
\begin{aligned}
&T_1(v) = \frac{\phi(v-i)}{\phi(v+i)}\frac{q(v+2i)}{q(v)} + \frac{q(v-2i)}{q(v)},\\
&q(v) = \prod_{j=1}^{n}(v - v_j), \quad \phi(v) = v^L \qquad (10)
\end{aligned}
$$

で与えられる．ただし，後の便宜上 $T(-iv-1)=T_1(v)$ とし（その固有値も $T_1(v)$ と書く），$v_j \to -iv_j-1$ とした．未知数 $\{v_j\}$ はベーテ仮説方程式

$$\frac{\phi(v_j-i)}{\phi(v_j+i)}=-\frac{q(v_j-2i)}{q(v_j+2i)} \qquad (11)$$

によって決定される．上式 $T_1(v)$ は $v=v_j$, $v=-i$ に極をもつが，統計重率の定義から，極は本来 $v=-i$ のみのはずである．(11) は $v=v_j$ が除去可能特異点となるための条件となることに注意してほしい．(8) により，$\mathscr{H}$ の固有値は

$$E=i\frac{\partial}{\partial v}\log T_1(v)\bigg|_{v=i}=-\sum_{j=1}^{n}\frac{2}{v_j^2+1}, \qquad (12)$$

で与えられる．(11) と (12) は変換 $v_j=\cot(k_j/2)$ を通して，2 節の結果に厳密に一致している．

5. T-system と Y-system

量子逆散乱法の発見により，可解模型を系統的に作り出すことが可能になった．つまり，ヤン・バクスター方程式の解ごとに，(8) に従って可解な量子系を作り出せるのである．例えば，高次スピンをもつ量子可積分模型は，**フュージョン**と呼ばれる角運動量の合成と類似の方法を R 行列に適用して作られる[15]．本稿の締め括りとして，このフュージョン模型の転送行列間に成立する関係式を用いて，ハイゼンベルク模型の物理量を求めよう．

6 頂点模型の転送行列 $T_1(v)$ を補助空間上で $(m-1)$ 回フュージョンした転送行列を $T_m(v)$ $(m \geq 1)$ とする．$T_m(v)$ は異なる m, v に関して可換 $([T_m(u),T_n(v)]=0)$ であり，その固有値（同じく $T_m(v)$ と書く）は，

$$T_m(v)=\sum_{1\leq i_1\leq\cdots\leq i_m\leq 2}\boxed{i_1}_{v+(m-1)i}\boxed{i_2}_{v+(m-3)i}\times\cdots\times\boxed{i_m}_{v-(m-1)i}$$

のように半標準ヤング盤を用いて表される[16]．ここで $\boxed{1}_v$ および $\boxed{2}_v$ は $T_1(v)$ (10) の右辺第一項および第二項を表す．この表式から $T_m(v)$ は次の関数関係式を満たすことがわかる（**T-system**）[16]：

$$T_m(v+i)T_m(v-i)=T_{m+1}(v)T_{m-1}(v)+g_m(v),$$

$(T_0(v)=1,\ T_{-1}(v)=0)$．ただし関数 $g_m(v)$ は

$$g_m(v)=\frac{\phi(v-(m+1)i)}{\phi(v+(m-1)i)}.$$

さらに $Y_m(v)=T_{m+1}(v)T_{m-1}(v)/g_m(v)$ と従属変数変換すれば

$$Y_m(v-i)Y_m(v+i)=(1+Y_{m+1}(v))(1+Y_{m-1}(v))$$

が成立することも容易にわかる（**Y-system**）．これらを用いると，6 頂点模型の転送行列 $T_1(v)$ は

$$T_1(v+i)T_1(v-i)=g_1(v)(1+Y_1(v))$$

と表される．フーリエ変換を用いると，これらは

$$\log Y_m(v)=f_m(v)+s*\log(1+Y_{m-1})(1+Y_{m+1})$$
$$\log T_1(v)=h(v)+s*\log(1+Y_1)g_1$$

なる積分方程式に書き換えられる．ここで，$s(v)=1/(4\cosh(\pi v/2))$ であり，$*$ は畳込み $s*f=\int_{-\infty}^{\infty}s(v-x)f(x)dx$ を表す．また，$f_m(v), h(v)$ はそれぞれ $Y_m(v)$ および $T_1(v)$ の解析性に依存する量であり，$\mathrm{Im}\,v\in[-1,1]$ の領域で $Y_m(v)$, $T_1(v)$ が零点と極の両方を持たなければゼロである．以上の手続きによって，ベーテ仮説方程式 (11) の求解問題が，$Y_m(v)$ と $T_1(v)$ の解析性を調べる問題に置き換えられたのである．固有状態の違いは，解析性の相違となって現れる．

基底状態では，$Y_1(v)$ が $g_1(v)$ 由来の自明な零点をもつ他は，$Y_m(v)$ $(m\geq 2)$, $T_1(v)$ は領域 $\mathrm{Im}\,v\in[-1,1]$ で非零・解析的である．従って，$Y_1(v)/\tanh^L(\pi v/4)$ と置くことによって，$f_1(v)=L\log(\tanh\frac{\pi}{4}v)$ が得られ，基底状態エネルギー E は (12) から

$$\frac{E}{L}=-\log 2+\frac{i}{L}\int_{-\infty}^{\infty}s'(i-x)\log(1+Y_1(x))dx$$

と与えられる．特に $L\to\infty$ の熱力学的極限では，$E/L=-\log 2$ とよく知られた結果を再現する．

上の方法は有限温度にも拡張できる[17]．この場合，温度に相当するパラメター $u=-\beta/(2N)$ $(N\gg 1;\ 1/T=\beta)$ を付加した転送行列を虚時間方向で定義すればよい．この転送行列の代数的な構造は通常の転送行列の場合と全く変わらず，従っ

て T-system および Y-system も変化しない．違いは $g_m(v)$ の関数形

$$g_m(v)=\frac{\varphi(v-i(u-m))\varphi(v+i(u-m))}{\varphi(v-i(u+m))\varphi(v+i(u+m))}$$

と，$Y_m(v)$ と $T_1(v)$ の解析性に現れる．ここで $\varphi(v)=v^N$ とした．$\mathrm{Im}\,v\in[-1,1]$ での解析性に関しては，$Y_1(v)$ に $g_1(v)$ 由来の自明な零点が現れるのみである．上と全く同じ方法で，$f_1(v)=-\frac{\pi\beta}{2\cosh(\pi v/2)}$ $(N\to\infty)$ が得られ，自由エネルギー密度 $f:=-\log T(0)/\beta$ は

$$f=-\log 2-T\int_{-\infty}^{\infty}s(v)\log(1+Y_1(v))dv$$

となる．これは，全く異なる方法である**熱力学的ベーテ仮説**[7]によって導出される結果と完全に一致している．

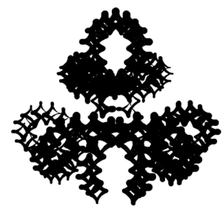
参考文献

1) 例えば，大貫義郎，吉田春夫：『力学』（現代物理学叢書），岩波書店 (2001).
2) 白石潤一：『量子可積分系入門』（SGC ライブラリ），サイエンス社 (2003).
3) 川上則雄，梁成吉：『共形場理論と 1 次元量子系』（新物理学選書），岩波書店 (1997).
4) 和達三樹：『非線形波動』（現代物理学叢書），岩波書店 (2000).
5) 出口哲生：物性研究 **74-3** (2000) 255.
6) V.E. Korepin, N.M Bogoliubov, A.G Izergin: *Quantum inverse scattering method and correlation functions*, Cambridge Univ. Press (1982).
7) M. Takahashi: *Thermodynamics of one dimensional Solvable models*, Cambridge Univ. Press (1999).
8) B. Sutherland: *Beautiful models*, World Scientific (2004).
9) 笹本智弘，本特集号および数理科学 2007 年 1 月号.
10) 酒井一博，数理科学 2008 年 2 月号.
11) H. Bethe, *Z. Phys.* **71** (1931) 205.
12) C.N. Yang, *Phys. Rev.* **168** (1968) 1920.
13) R.J. Baxter, *Phys. Rev. Lett.* **26** (1971) 832.
14) 堺和光，物性研究 **87-2** (2006) 214.
15) P.P. Kulish, N.Yu. Reshetikhin and E.K. Sklyanin, *Lett. Math. Phys.* **5** (1981) 393.
16) A. Kuniba, T. Nakanishi and J. Suzuki, arXiv: 1010.1344 (2010).
17) A. Kuniba, K. Sakai and J. Suzuki, *Nucl. Phys.* **B525** 597.

（さかい・かずみつ，東京大学大学院総合文化研究科）

量子系の非平衡統計力学

作用素環論と非平衡



緒方 芳子

1. はじめに

本稿では量子系における非平衡統計力学の，作用素環を用いたアプローチについてご紹介します．非平衡と一言で言っても，その捉え方は様々ですが，ここで扱うモデルはその中で最も素朴なもの，つまりハミルトニアン系を考えます．すなわち，我々の系は量子力学に従い，ハミルトニアンがその時間発展を定めるというものです．この設定の下で，散逸やエネルギーの流れ，時間反転対称性の破れについて理解したいわけです．ところが有限次元のハミルトニアン系は単に振動を繰り返すだけですから，散逸と言った現象を表すには無限系を考えなくてはいけません．そこで必要になってくるのが C^*–力学系の枠組みです．本稿では，この枠組みを用いた非平衡定常状態の解析について解説したいと思います．

2. C^*–力学系

この節では C^*–力学系の基本的な言葉について準備します．C^*–環と書くと抽象的で分かりずらいかもしれないですが行列環やヒルベルト空間上の有界線型作用素全体は C^*–環です．この C^*–環が物理系を表します．一般に C^*–環が単位元 1 を持つとは限らないのですが，ここでは 1 を持つと仮定しましょう．C^*–環上の正の有界線型汎関数 ω で，$\omega(1)=1$ となるものを状態と呼びます．量子力学で状態と呼ばれるものは密度行列 ρ を用いて

$$\omega(A)=Tr\rho A \tag{1}$$

と書かれましたが，ここで話している状態はこの一般の C^*–環への拡張です．時間発展は C^*–環上の一径数自己同型群 τ_t によって与えられます．これは，生成子と呼ばれる一般には非有界な作用素 δ を用いて $\tau^t=e^{t\delta}$ の形で書くことができます．

例えば，自己共役な行列 H に対して，

$$\tau^t(A)=e^{itH}Ae^{-itH} \tag{2}$$

は一径数自己同型群です．言うまでもなく，これは量子力学でハミルトニアン H の与える時間発展でした．この時間発展の生成子は $\delta(A)=i[H,A]$ となります．

3. 熱平衡状態

非平衡について考える前に，まず無限に広がった系の熱平衡状態がどのように与えられるかを見てみましょう．

$n\times n$ 行列で与えられる有限次元量子系では熱平衡状態はギブス分布で表されます．温度 β^{-1} におけるギブス分布は，密度行列

$$\frac{e^{-\beta H}}{Tre^{-\beta H}} \tag{3}$$

で与えられます．この分布において物理量 A の期

待値は

$$\omega(A) = \frac{Tre^{-\beta H}A}{Tre^{-\beta H}} \tag{4}$$

となります．さて，無限系の状態をこの標識で与えようとしますと，H のところに無限に広がった系のハミルトニアンを代入しなくてはいけなくなりますが，これは一般に数学的に不可能です．そこで「有限次元系ではそれを満たす状態がギブス分布に帰着するような，熱平衡状態を表す条件」を見つける必要があります．そうした条件として，Kubo–Martin–Schwinger（KMS）条件があります．C^*–環の元 A に対して $\tau^t(A)$ が複素平面全体に解析接続できるときに A は τ–解析的と言います．

定義 3.1（KMS 条件） 与えられた時間発展 τ に対して状態 ω が (τ, β)–KMS 条件を満たすとは，τ–解析的な任意の A, B について

$$\omega(A\tau_{i\beta}(B)) = \omega(BA) \tag{5}$$

が成り立つことを言う．

この条件を表す状態は，時間発展について不変であることを示すことができます．熱平衡状態ですから，物理的には当然満たされるべき性質です．行列環について，時間発展が (2) によって与えられる系について，ギブス分布 (4) がこの条件を満たすことを見るのは読者にお任せします．

4. 非平衡定常状態

我々の観測するシステムを S とします．S の左右に 2 つの温度の異なる熱浴 B_L, B_R をつなげます．これらの系は初め相互作用していなかったものが，時刻 0 で相互作用を開始します．この相互作用によって，熱浴とシステムとの間に熱のやりとりが生じるわけです．すると，温度の高いほうから低いほうへと S を通るエネルギーの流れが生じるはずです．こうして非平衡系を作ります．熱浴という言葉が表すように，B_L, B_R は無限に広がった物理系でなくてはいけません．そうでないと，非平衡を保つ “無限のポンプ” としての役割が果たせません．

こうして作られた系について，時間が無限に経ったときにこの系が至る状態のことを非平衡定常状態と言うことにします．これが我々の量子ハミルトニアン系における非平衡定常状態のモデル化の仕方です．

それでは，この状況を数学的にどのように定義するかを見てみましょう．まず 2 つの熱浴は無限次元 C^*–環 $\mathcal{A}_L, \mathcal{A}_R$ で，システム S は有限次元 C^*–環 $\mathcal{A}_S$ で表すことにします．それぞれの独立な時間発展を τ_L, τ_R, τ_S とします．2 つの熱浴の温度を $\beta_L^{-1}, \beta_R^{-1}$ とすると，左右の熱浴はそれぞれ時刻 0 で (τ_L, β_L)–KMS 状態 ω_{β_L}，(τ_R, β_R)–KMS 状態 ω_{β_R} にあります．システムの初期状態を τ_S–不変な状態 ω_S とします．この τ_S–不変性は多くの場合必要ないのですが，ここでは簡単のため仮定しておきます．このとき全系の初期状態はテンソル積 $\omega = \omega_{\beta_L} \otimes \omega_S \otimes \omega_{\beta_R}$ で与えられます．

時刻 0 以前の時間発展は，$\tau_0 = \tau_L \otimes \tau_S \otimes \tau_R$，で与えられています．この生成子を δ_0 と書きます．

左右の熱浴とシステムとの間の相互作用は C^*–環の自己共役な元 P で与えられます．時刻 0 で，相互作用 P をいれると，これ以降の時間発展は，生成子 $\delta := \delta_0 + i[P, \cdot]$ をもつ τ で与えられます．

この τ に対して，状態 ω_+ が C^*–環 $\mathcal{A}$ のすべての元 A に対して

$$\omega_+(A) = \lim_{t \to \infty} \omega_0(\tau^t(A))$$

を満たすとき，この ω_+ を非平衡定常状態と呼びます．上に書いた物理的な設定をそのまま数学の言葉で書き直したわけです．注意してほしいことは極限は A を固定するごとに取っているということです．これはシステムの周辺の性質だけに着目している，ということに相当します．興味あるのはあくまでシステム周辺の物理なわけです．

この極限状態が存在することは物理的には当り前に思えることですが，数学的には証明しなくてはいけない事柄です．しかし，いきなりこのよう

な極限をとれ，と言われても，状態というのは単に線型汎関数であるというだけですから，そのまま極限の有無を議論するのは難しいものがあります．この問題の解析についてこれから見ていきましょう．

5. 漸近的可換性と散乱理論

この問題への初めのアプローチとしてなされたのが，以下の散乱理論を用いた解析です．そのためには，L^1–漸近的可換性という性質を仮定しなくてはいけません．C^*–環 $\mathcal{A}$ と時間発展 τ^t に対して，$\mathcal{A}$ の任意の元 A, B に対して積分

$$\int_0^\infty dt \left\| [A, \tau^t(B)] \right\| \tag{6}$$

が有限であるとき，C^*–力学系 $(\tau, \mathcal{A})$ は L^1–漸近的可換であると言います．これは物理的にどのような状況でしょうか．物理的な設定では，C^*–環の元で表される量とは空間的にはある部分にほぼ局在化しているものとして理解できます．ですから，A を固定したときに，それはある空間領域 S_A の周りにほぼ局在化しているわけです．一方 $\tau^t(B)$ は物理量 B が時刻 t まで時間発展したものです．式 (6) の積分が有限値をとるというのは，$[A, \tau^t(B)]$ が t が大きくなるにつれてどんどん小さくなっていく，ということを意味しています．つまり A と $\tau^t(B)$ はどんどん可換に近くなっていくのです．これは $\tau^t(B)$ のうち空間領域 S_A にかかっている“部分”がどんどん少なくなっているということです．これが任意の A について成り立つのですから，τ^t は無限遠方に飛んでいってしまう，あるいは無限領域に広がっていってしまうと理解できます．その飛んで行き方，広がり方が (6) が有限な値をとるぐらい十分速いと言っているわけです．

さて，もしこの仮定が成り立つとしますと，次のような写像の存在が言えます．

$$\gamma_+(A) := \lim_{t\to\infty} \tau_0^{-t} \circ \tau^t(A), \quad A \in \mathcal{A}. \tag{7}$$

ここで，τ_0 は熱浴との相互作用を入れない時間発展，τ は入れた時間発展になります．

初期状態 ω は τ_0 について不変です．このことを用いると我々の知りたい非平衡定常状態 ω_+ は

$$\begin{aligned}\omega_+(A) &= \lim_{t\to\infty} \omega \circ \tau^t(A) \\ &= \lim_{t\to\infty} \omega \circ \tau_0^{-t} \circ \tau^t(A) \\ &= \omega \circ \gamma_+(A), \quad A \in \mathcal{A}\end{aligned}$$

と, 上の γ_+ によって与えられることがわかります．

このようにして，L^1–漸近的可換性という性質を満たす系については，非平衡定常状態の存在を言うことができます．しかしながら，この L^1–漸近的可換性という仮定は強すぎて，単に熱浴に小さな物理系をつけたものでもこの仮定を満たすとは期待できません．そこで非平衡定常状態を考えるための他の方法が必要になってきます．

6. GNS 表現

そこで，この極限の問題を，ヒルベルト空間上の作用素の話に持っていくということを考えます．ヒルベルト空間上の作用素は，一般の Banach 空間上の作用素により調べやすいので, ヒルベルト空間上の作用素の問題に帰着することで, 問題は扱いやすくなります．ここではどのようにこのヒルベルト空間を導入するのかについて説明しましょう．

与えられた C^*–環 $\mathcal{A}$ と，その上の状態 ω に対して $\mathcal{A} \times \mathcal{A}$ 上の双線型汎関数

$$(A, B) = \omega(B^* A), \quad A, B \in \mathcal{A}$$

を考えてみましょう．簡単のため $(A, A) = \omega(A^* A) = 0$ となる A が $A = 0$ に限るとしますと，これは内積になり，完備化することでヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ ができます．さらに，1 に対応する $\mathcal{H}$ の元を Ω としますと，$\mathcal{H}$ 上の表現 π で $\pi(\mathcal{A})\Omega$ が $\mathcal{H}$ で稠密となるような C^*–環 $\mathcal{A}$ の $\mathcal{H}$ 上の表現が定義できます．そして状態 ω は

$$\omega(A) = (\pi(A)\Omega, \Omega), \quad A \in \mathcal{A}$$

と表されます．この三つ組 $(\mathcal{H}, \pi, \Omega)$ の構成法を GNS（Gelfand–Naimark–Segal）構成法と呼

びます．

与えられた ω の GNS ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の任意の単位ベクトル ξ に対して，$\psi_\xi(A) := (\pi(A)\xi, \xi)$ とすると，これは明らかに $\mathcal{A}$ 上の状態になります．しかし，無限次元の場合，C^*–環 $\mathcal{A}$ のすべての状態が固定された ω から作られたこのヒルベルト空間上のベクトルで与えられるわけではありません．むしろ，このヒルベルト空間で与えられるような状態は ω に十分近いという特別な性質を持っています．

7. リウヴィリアンと熱平衡状態

さて，C^*–環の上の状態の時間発展の話を上で作られた GNS ヒルベルト空間上の時間発展の話に書き直すことによって，解析することが目標でした．ここでは，第 3 節の設定で，特に左側の温度と右側の温度が同じ場合，すなわち $\beta_L = \beta_R$ となる場合を考えてみましょう．我々の考える時間発展というのは，部分系ごとの自由な時間発展 τ_0 に対して相互作用 P を入れて得られる τ のことでした．

$\beta_L = \beta_R$ という場合は，ある特別な性質を持っています．それは，この相互作用を入れた時間発展 τ について，(τ, β)–KMS 状態が初期状態 ω の GNS ヒルベルト空間の中のベクトルで表されるということです．このベクトルを Ω_P と書くと，

$$\omega_P(A) = (\pi(A)\Omega_P, \Omega_P)$$

で与えられる状態は相互作用を入れたハミルトニアンの熱平衡状態です．

さて，前に述べましたように，KMS 状態は時間発展について不変です．このことを用いますと，以下のようにして時間発展を GNS 空間上のユニタリー作用素で表すことができることがわかります．ヒルベルト空間上の作用素 U_t を

$$U_t\pi(A)\Omega_P := \pi(\tau^t(A))\Omega_P, \quad A \in \mathcal{A}. \tag{8}$$

と定めてみましょう．すると，ω_P の τ–不変性から

$$\begin{aligned}\|U_t\pi(A)\Omega_P\|^2 &= \left\|\pi(\tau^t(A))\Omega_P\right\|^2 \\ &= \omega_P(\tau^t(A^*A)) \\ &= \omega_P(A^*A) \\ &= \|\pi(A)\Omega_P\|^2 \end{aligned} \tag{9}$$

となり，U_t は，ユニタリー作用素に拡張できることがわかります．この拡張を同じ U_t で表すことにするとこれは自己共役作用素 L を用いて

$$U_t = e^{itL}$$

と書くことができます．この L はリウヴィリアンと呼ばれます．τ^t をそのまま書き下すと

$$\pi(\tau^t(A)) = e^{itL}\pi(A)e^{-itL} \tag{10}$$

となることがわかります．以上のようにして，C^*–環上の時間発展の解析がヒルベルト空間上の自己共役作用素の問題に帰着するわけです．

それでは，L のスペクトルの性質からわかる時間発展の漸近的な性質について調べてみましょう．明らかに，Ω_P は L の固有値 0 に対応する固有ベクトルです．ここで，L のそれ以外のスペクトルが絶対連続であると仮定しましょう．先に述べましたように，ω の GNS ヒルベルト空間内のベクトルで表されるような状態，というのはある意味 ω に近い状態と言えます．L のスペクトルについて上のように仮定すると，このような状態はすべて $t \to \infty$ で状態 ω_P に収束することがわかります．これを見てみましょう．

ヒルベルト空間ベクトルは τ–解析的な $A \in \mathcal{A}$ について $\pi(A)\Omega_P$ という形のベクトルで任意に良く近似することができます．そこで，$\pi(A)\Omega_P$ というベクトルで与えられる状態 $\eta(B) = (\pi(B)\pi(A)\Omega_P, \pi(A)\Omega_P)$ の漸近的振舞いを見ることにします．

まず，KMS 条件を用いた以下の簡単な計算をすると，

$$\begin{aligned}&\eta(\tau^t(B)) = (\pi(\tau^t(B))\pi(A)\Omega_P, \pi(A)\Omega_P) \\ &= \omega_P(A^*\tau^t(B)A) = \omega_P\left(\tau^{-i\beta}(A)(A^*\tau^t(B))\right) \\ &= (\pi(\tau^t(B))\Omega_P, \pi(A)\pi((\tau^{-i\beta}(A))^*)\Omega_P)\end{aligned}$$

$$= (e^{itL}\pi(B)\Omega_P, \pi(A)\pi((\tau^{-i\beta}(A))^*)\Omega_P).$$

となり，問題が $(e^{itL}\psi,\xi)$, $\psi,\xi\in\mathcal{H}$ という量の解析になることがわかります．この $(e^{itL}\psi,\xi)$ は，(10) から直接くる $(e^{itL}\pi(A)e^{-itL}\psi,\xi)$ の形の量の解析に比べて，ずっと楽です．

今，L についてのスペクトルの仮定から e^{itL} は Ω_P からなる 1 次元部分空間への射影へと弱収束します．このことから，(11) の最後の項は，

$$\begin{aligned}
&\lim_{t\to\infty}\eta(\tau^t(B))\\
&= \lim_{t\to\infty}(e^{itL}\pi(B)\Omega_P, \pi(A)\pi((\tau^{-i\beta}(A))^*)\Omega_P)\\
&= (\pi(B)\Omega_P,\Omega_P)(\Omega_P,\pi(A)\pi((\tau^{-i\beta}(A))^*)\Omega_P)\\
&= \omega_P(B)\omega_P(\tau^{-i\beta}(A)A^*)\\
&= \omega_P(B)\omega_P(A^*A)\\
&= \omega_P(B)
\end{aligned}$$

と収束することがわかります．これは，相互作用を含んだ時間発展の結果，η が，全系の熱平衡状態 ω_P へと収束する，ということを意味します．非平衡定常状態の定義から，この場合の非平衡定常状態は全系についての熱平衡状態にであることになります．実際上記の L の 0 以外のスペクトルの絶対連続性を示すことで，この熱平衡状態への収束が具体的なモデルで示されています．

8. C–リウヴィリアンと非平衡

前節では $\beta_L=\beta_R$ の場合を考えました．それでは $\beta_L\neq\beta_R$ の場合，すなわち真に非平衡な場合はどうなるでしょうか．相互作用 P を含まない時間発展 τ_0 については Ω は不変ベクトルになりますから前と同じように

$$e^{itL_0}\pi(A)\Omega = \pi(\tau_0^t(A))\Omega \tag{11}$$

を与える自己共役作用素 L_0 が存在します．しかしもちろんこれは我々が興味ある時間発展ではありません．相互作用を含んだ時間発展 τ の解析の困難は，ω の GNS ヒルベルト空間内のベクトルで表されるような状態で，τ^t について不変となるようなものが一般には存在しないことにあります．先のリウヴィリアンは不変ベクトルの存在により (8) のようにして表されていました．実は，不変ベクトル Ω_P が存在しなくても同様のことを考えることはできます．初期状態 ω を表すベクトル Ω に対して，

$$V_t\pi(A)\Omega = \pi(\tau^t(A))\Omega \tag{12}$$

とするのです．前と違うことは，ω が時間発展について不変でないので (9) の議論ができないということです．すなわち，V_t はもはやユニタリー作用素に拡張できません．したがって時間発展はヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上で，自己共役作用素によって表現され得ないのです．

これを推し進めて V_t を，我々が知っているものによって書き下してやろう，ということをしたのが Jakšić と Pillet です．次にこれを説明しましょう．

Jakšić と Pillet の議論を始めるには，作用素環の富田–竹崎理論に現れるモジュラー作用素という作用素が必要になります．次のような作用素 S

$$S\pi(A)\Omega := \pi(A^*)\Omega, \quad A\in\mathcal{A}$$

を考えます．これは反線型で閉な作用素に拡張できることが証明できます．その拡張を再び S とし，極分解を

$$S = J\Delta^{\frac{1}{2}}$$

と書きましょう．この Δ がモジュラー作用素です．

さて，これらを用いて V_t を考えてみます．系が良い条件を満たすとき，V_t は $V_t=e^{itL}$ の形で書くことができます．ただし，前と違って，L は非自己共役な作用素になります．この L は何でしょうか．

式 (12) を $t=0$ で微分してみると，

$$iL\pi(A)\Omega = \pi(\delta(A))\Omega, \tag{13}$$

となります．ここで δ は τ の生成子です．τ は τ_0 に相互作用 P を加えたものでしたから，τ_0 の生成子を δ_0 とすると，

$$\delta(A) = \delta_0(A) + i[P, A] \tag{14}$$

となります．一方，式 (11) を $t = 0$ で微分すると

$$iL_0\pi(A)\Omega = \pi(\delta_0(A))\Omega \tag{15}$$

が得られます．これを用いると (13) は

$$\begin{aligned} & iL\pi(A)\Omega = \pi(\delta(A))\Omega \\ &= \pi(\delta_0(A))\Omega + i[\pi(P), \pi(A)]\Omega \\ &= iL_0\pi(A)\Omega + i[\pi(P), \pi(A)]\Omega \end{aligned} \tag{16}$$

となります．ここで，最後の項にある $\pi(A)\pi(P)\Omega$ を，$\pi(A)\Omega$ に何らかの作用素を掛けた形に書き直せれば成功です．これをするために，先のモジュラー作用素を使います．すると，

$$\begin{aligned} \pi(A)\pi(P)\Omega &= S\pi(P)\pi(A^*)\Omega \\ &= S\pi(P)S\pi(A)\Omega \\ &= J\Delta^{\frac{1}{2}}\pi(P)J\Delta^{\frac{1}{2}}\pi(A)\Omega. \end{aligned} \tag{17}$$

以上のことから，ヒルベルト空間上で時間発展を表す作用素 L は，

$$L = L_0 + \pi(P) - J\Delta^{\frac{1}{2}}\pi(P)J\Delta^{\frac{1}{2}}$$

で与えられることがわかりました．Jakšić と Pillet はこれに C–リウヴィリアンという名前をつけました．一般に C–リウヴィリアンは非自己共役作用素です．この L を用いると ω の時間発展は $\omega(\tau^t(A)) = (e^{itL}\pi(A)\Omega_P, \Omega_P)$ と書くことができます．あとはこの L のスペクトル解析をすればよいわけです．実際各モデルでこの L は具体的に書き表すことのできるものです．

C–リウヴィリアンの導入により，非平衡定常状態の解析が，ヒルベルト空間内の非自己共役作用素のスペクトル解析に帰着されることになりました．これにより，熱浴に接した有限系といったモデルの解析が可能になりました．

9. 最後に

以上見てきましたように，それまで漸近的可換性を満たす系でしか行うことのできなかった非平衡系の解析の範囲が Jakšić と Pillet により広げられました．その鍵となったのは，作用素環の富田–竹崎理論を初めとした一連の枠組みです．さらにこの作用素環の枠組みを用いることにより，線型応答理論やエネルギー流の揺らぎといったことを調べることができるようになりました．とはいえ，ハミルトニアンによって時間発展する量子系の非平衡統計力学の研究は，まだ分からないことばかりで，解析できるモデルも限られており，今後のテクニックを含めた発展が期待されるところです．

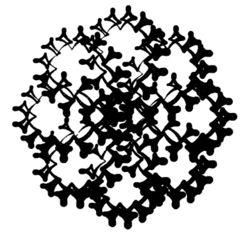
参考文献

1) Ruelle, David Natural nonequilibrium states in quantum statistical mechanics. *J. Statist. Phys.* **98** (2000), no.1-2, 57–75.
2) Jakšić, V.; Pillet, C.-A. Non-equilibrium steady states of finite quantum systems coupled to thermal reservoirs. *Comm. Math. Phys.* **226** (2002), no.1, 131–162.
3) O. Bratteli, D.W. Robinson: *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 1.*; Springer-Verlag, (1986).

（おがた・よしこ，東京大学大学院数理科学研究科）

力学系によるアプローチ

振動現象を具体例として



郡　宏

1. 力学系とは？

物体の位置や状態の時間変化，つまりダイナミクスを理解したいときに使用する数学の道具は微分方程式やマップ（漸化式）などの時間発展方程式である．その代表例はニュートン方程式

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{F} \tag{1}$$

であろう．ここで $\boldsymbol{r}$ は物体の座標，m は質量，$\boldsymbol{F}$ は物体にかかる力である．ニュートン方程式を基礎とした物体の運動を取り扱う学問を**力学**（mechanics）と呼ぶ．

しかしながら，我々が記述し理解したいと思う「移ろいゆくもの」は，ニュートン方程式に従うような物体とは限らない．例えば，動植物の個体数（生態系），天気，化学反応，さらには，人間関係や脳など，様々な対象があり得る．このように時間発展する対象を一般に**力学系**（dynamical systems）と呼ぶ．どのような対象であれ，その時間発展は原理的には微分方程式で記述できる．力学系の慣習では，微分方程式を次のように1階の連立微分方程式系で記述する．

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, t). \tag{2}$$

ここで $\boldsymbol{x}$ は状態変数，関数 $\boldsymbol{f}$ は状態変数と時間の関数であり，空間微分などの演算子が含まれる場合もある．ニュートン方程式 (1) のような2階の微分方程式も $\dot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{v}$ と置くことによって新たな変数 $\boldsymbol{v}$ を導入すれば，$\dot{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{F}$ と書けるので，$\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v})^\top$ とすれば，式 (2) に含まれる．より多階の微分方程式も同様である．力学系という日本語を聞くと力学の一種に感じるかもしれないが，逆に力学を含む枠組みである．

力学系は数学・物理の一分野として発展しており，そこでは様々な数学的手法が培われている．本解説では力学系の重要概念や現象理解に役立つ強力な手法を，いくつかの素材を具体的に取り扱いながら解説していこう．

2. アトラクタ

まず，**アトラクタ**から始めよう．アトラクタとは，適当な初期条件から始めたときに，時間とともに接近していく状態のことである．例えば線形減衰振動

$$\dot{r} = v, \quad m\dot{v} = -kr - \gamma v \tag{3}$$

では減衰率 γ が正のとき，$r = v = 0$ で表される**定常状態**（stationary state）がアトラクタである（図 1）．アトラクタは必ずしも定常状態ではなく，周期的運動状態や非周期的な運動状態（カオス）などもあり得る．

アトラクタは，エネルギー保存則の成り立つハミルトン系では存在しない．例として2次元力学系を考えよう（図1参照）．ある時刻 t において相空間上にある閉じた集合を考え，この集合内の点

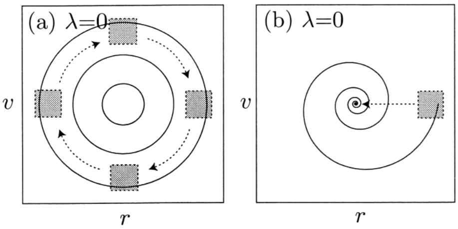


図 1　(a) 調和振動子（$\lambda = 0$）と (b) 減衰振動子（$\lambda > 0$）の軌道．調和振動子については3つの異なる初期条件に対する軌道である．グレーの領域は状態の集合で，どのように時間発展するかが描かれている．

が時間とともにどのように発展していくかを考える．この集合は時間とともに変形する．アトラクタがある場合は，この集合はより低次元の集合へと接近し，定常状態の場合は0次元，周期軌道の場合は1次元の軌道に収束する．つまり，集合の面積は最終的に0となる．一方，ハミルトン系ではリウヴィルの定理によって，その集合の面積は一定に保たれることが示される．したがって，アトラクタはハミルトン系には存在しない．

我々の研究対象は，そのほとんどが摩擦やエネルギー供給を受ける**散逸系**（あるいは開放系ともよばれる）であり，そこにはアトラクタが存在する．アトラクタの特徴は安定性である．つまり，系に何らかの乱れがあっても，乱れが小さい限りは，運動はアトラクタの近傍に留まる．したがって系のアトラクタを見つけ，アトラクタの性質やその近傍の性質がわかれば，系のダイナミクスについてかなりの理解が得られる．

3. リミットサイクル

ニュートン力学系で現れる振動現象の代表例は，振り子などの自由運動であり，これはハミルトン系である．しかしこのような振動と生物などで見られる振動現象の間には大きな違いがある．上述した安定性である．

次のような思考実験をしてみよう．摩擦のない振り子を突いてみる．すると振幅が変化し，違う周期軌道に遷移する．どんなに軽く突いても振幅は変化してしまい，もとの周期軌道には戻らない．この意味で振り子の持つ周期軌道はアトラクタではない．一方，安静にした状態で，胸を外からぽんぽんとたたいてみよう．たたいた直後は心臓の振動が少しは乱れているかもしれないが，十分時間が経てば，拍動の振幅が大きく，あるいは小さくなったような状態には遷移していないだろう．この意味で，心臓の拍動は安定である．同様の性質は機械式のメトロノームや振り子時計にもある．手元にこれらがある場合は，その周期軌道が初期状態によらないこと，また外から乱れを与えても，再びまた元の周期軌道に戻ることを観察してみよう．つまり，これらの振動状態はアトラクタである．

散逸系に現れる安定な振動現象は，リミットサイクル振動と呼ばれる．2つ例を挙げよう．

3.1 メトロノーム

まずは，メトロノームの安定性の起源について考察しよう．メトロノームの針の運動は，摩擦によって減衰する．しかし針は中央付近を通過するときに，運動している方向に弾かれる機構がある．この力はゼンマイに蓄えられたエネルギーによって与えられている．ここで振動の1周期でのエネルギーの収支を考えよう．摩擦によって失うエネルギーは，振動の振幅 A と共に増大する．一方，ゼンマイから得るエネルギーは，振幅によらずだいたい一定であると考えよう．これをグラフにしたのが，図2である．振幅が大きいと失うエネルギーのほうが大きい．だから振幅は小さくなって

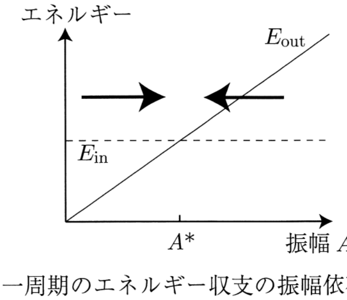


図 2　一周期のエネルギー収支の振幅依存性．交点 A^* に自発的に収束し，そこでは得るエネルギーと失うエネルギーがバランスする．この図では振幅依存性を直線としているが，交点があればどのような依存性でもいい．

いく．一方，振幅が小さいと得るエネルギーのほうが大きい．だから振幅は大きくなる．その結果，エネルギー収支がバランスする交点 $A = A^*$ に，メトロノームは自発的にたどり着く．かくしてメトロノームは安定した振幅で振動するのである．

次に，メトロノームの運動方程式を構築する．上述の考察が正しければ，減衰振動子が中心付近を通過するときに，その運動方向に力が加わるようにするだけでいいはずである．減衰項は単純さを優先し，速度に比例する粘性抵抗を採用しよう．そしてこれに力 $p(r, \dot{r})$ を加えた次の方程式を考える．

$$\dot{r} = v, \quad m\dot{v} = -kr - \gamma v + p(r, v). \qquad (4)$$

ここで，関数 p がメトロノームの状態変数 r と v のみ関数であり，時間を陽に含まないものとした点に注意したい．メトロノームは，針の状態によって力が決まる，いわゆる自己駆動系であり，時間的にスケジュールされた力が加わっているわけではない*1)．

関数 p は次のようなものが適切であろう．

$$p(r, v) = \begin{cases} p_+(r) & \text{for } v > 0, \\ p_-(r) & \text{for } v < 0. \end{cases} \qquad (5)$$

ここで $p_+(r)$ は，$r > 0$ のある限られた領域で正の値を持つ関数であり，$p_-(r)$ はそれを反転させたもの，つまり，$p_-(r) = -p_+(-r)$ である．ここでは図 3 (a) のような関数を仮定する．式 (4) を数値積分すると，確かにリミットサイクル軌道がアトラクタとなっていることが確かめられる (図 3)．

3.2 化学反応系

化学反応でも振動性の反応が現れることが知られている．その代表例は Belousov–Zhabotinsky (BZ) 反応なのだが，これは複雑なので，ここではプリゴジンらによって考案されたブラッセレータ (Brusselator) と呼ばれる仮想的な化学反応系を紹介する1)．ブラッセレータは次の反応式で表

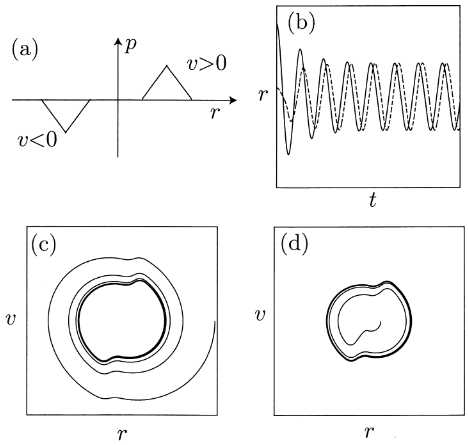


図 3　メトロノームの数理モデルに関して．(a) 関数 $p(r, v)$．(b) 大小 2 つの異なる初期条件からの時系列．(c), (d) 大小 2 つの異なる初期条件に対する軌道．周期解（リミットサイクル軌道）に接近していく様子がわかる．

される．

$$\begin{aligned} &A \to X, \\ &2X + Y \to 3X, \\ &B + X \to Y + D, \\ &X \to E. \end{aligned}$$

反応式を見てわかる通り，分子 A と分子 B は時間と共に減少していく．しかし，その量があまり変化しない程度の時間領域を考えるか，あるいは量が変化しないように外部から供給し続けている状況を考えよう．各分子の濃度を対応する小文字で表し，a と b を定数とし，x と y の時間変化に着目する．**質量作用の法則**に従って微分方程式を書き下すと

$$\begin{aligned} \dot{x} &= a + x^2 y - bx - x, \\ \dot{y} &= bx - x^2 y \end{aligned} \qquad (6)$$

を得る．ここで，反応係数（つまり各項の係数）はすべて 1 と仮定している．

まず定常状態を調べよう．式 (6) で $\dot{x} = \dot{y} = 0$ と置くと，定常解 $x = a$, $y = b/a$ を得る．この状態は式 (6) の解として常に存在しているが，安定解，つまりアトラクタとなっているとは限らな

*1)　式 (2) で，右辺に陽に時間が現れない系を**自律系**と呼び，時間周期的な外力など時間が陽に現れる系を**非自律系**と呼ぶ．自己駆動系とは自律系で記述することに他ならない．

い．そこで**線形安定性**を調べよう．まず，微小量 $\Delta x, \Delta y$ を用いて，定常状態から少しずれた状態を $x = a + \Delta x, y = b/a + \Delta y$ と表現する．次に，この x, y を式 (6) に代入し $\Delta x, \Delta y$ に対して線形化すると

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = L\boldsymbol{\xi}, \quad L = \begin{pmatrix} b-1 & a^2 \\ -b & -a^2 \end{pmatrix} \tag{7}$$

を得る．ここで，$\boldsymbol{\xi} = (\Delta x, \Delta y)^\top$, L は**ヤコビ行列**である．

ヤコビ行列 L の固有値の実部がすべて負のとき，どのような摂動も時間的に指数関数的に減衰するので定常解はアトラクタであり，1 つでも正であれば不安定解となる．固有値を λ として L に対する固有方程式を解くと

$$\lambda = \frac{-(a^2 - b + 1) \pm \sqrt{(a^2 - b + 1)^2 - 4a^2}}{2} \tag{8}$$

を得る．これより直ちに，$b = b_{\mathrm{cr}} \equiv 1 + a^2$ を境に安定性が切り替わることがわかる．$b < b_{\mathrm{cr}}$ のときは，2 つの固有値の実部は負であり，安定解であることがわかる．一方，$b > b_{\mathrm{cr}}$ では実部が正で不安定解である．

さて，定常解が不安定化するとどうなるのであろうか？ まずは数値的に検証しよう．式 (6) で $a = 1.0$ と固定し，様々な値の b に対して，適当な初期条件から数値シミュレーションを行った．十分時間が経過してから，x の最大値と最小値を求めたのが図 4 である．$b < b_{\mathrm{cr}} = 2.0$ に対しては定常状態だが，$b > b_{\mathrm{cr}}$ では最大値と最小値が異なっている．軌道を観察すると，これがリミットサイクル振動であることがわかる．このリミットサイクルの出現を数学的にどのように説明するかについて，次節で解説する．

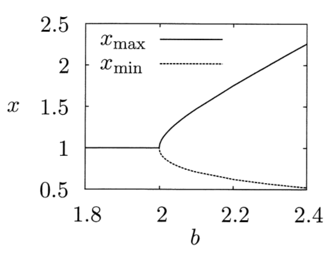


図 4　ブラッセレータの数値シミュレーション．

4. 分岐と中心多様体縮約理論

ブラッセレータは力学系の重要な概念である**分岐**（bifurcation）を説明するのに格好の題材である．$b = b_{\mathrm{cr}}$ でアトラクタの種類が変化したが，このように解の安定性が切り替わったり，あるいは新しい解が現れたりするなどして，状態空間に定性的な変化が起こることを分岐と呼び，分岐の起こるパラメタ値のことを分岐点と呼ぶ．分岐には様々な種類があるのだが，パラメタの変化と共に 1 組の固有値が虚軸を横切る今回のケースは **Hopf 分岐**と呼ばれる．Hopf 分岐は定常状態から振動現象が生まれる典型的なシナリオである．

Hopf 分岐で定常状態が不安定化するとき，その固有値は複素数なので振動しながら定常状態から離れていく．しかしその振幅は無制限に大きくなれるわけではなく，系の非線形性によってやがて押さえ込まれ，線形項に起因する不安定性と非線形項に起因する安定性の効果がバランスするところで止まる．ここにリミットサイクル軌道が現れる．

このことを数学的に説明する有用な道具が**中心多様体理論**（**center manifold theory**）である．この理論は，分岐近傍にある力学系の挙動が，分岐に伴って不安定化する小数自由度のモードに実効的に支配されているという事実に基づいて，力学系を摂動展開と座標変換によって系統的に**標準型**（normal form）に帰着させる（理論の詳細は，例えば文献 2) を参照）．Hopf 分岐の場合は次の標準型が得られる．

$$\dot{w} = \alpha w - \beta w|w|^2 + O(w^5). \tag{9}$$

ここで w は複素振幅と呼ばれる複素数の変数である*2)．α, β は複素パラメタで，その表式は元の力

*2)　式 (9) の $O(w^5)$ を無視したものは Stuart–Landau 振動子と呼ばれ，振動現象の研究に頻繁に用いられる．

学系が与えられれば求められる．w は元の力学系の定常状態付近に現れる軌道を適当に変数変換したものである．α の実部は分岐パラメタ $\mu \equiv b - b_{\rm cr}$ に比例しており $\mu = 0$ を境に，定常解 $w = 0$ が不安定化する．3次の項の係数 β の実部が正の場合は，この項によって不安定性が抑えられ，振幅が $O(\sqrt{\mu})$ のリミットサイクル解が現れる．このことは式(9)で $w = re^{i\phi}$ と極座標表示すると簡単に確かめられる．一方，β の実部が負の場合は，3次の項では不安定性が抑えられず $O(w^5)$ の項を考えなければならない．なお，ブラッセレータの場合は β の実部が常に正であることが示せ，$\mu > 0$ のときにリミットサイクルが現れることが証明できる[3)]．図4を見ると，分岐点近くにおいて振幅が急激に増加しているが，これは標準型から説明されているとおり，振幅が $O(\sqrt{\mu})$ の立ち上がりを持つためである．

標準型は分岐のタイプによって決まるもので，元の力学系の詳細によらない．詳細に依存するのは，標準型のパラメタのみである．今回の例は2次元のモデルであるブラッセレータを扱ったが，これより高次元のモデルでも同様に2次元の式(9)に帰着する．これは，Hopf分岐では，不安定化するモードが2つだからである．この意味で中心多様体理論は強力な縮約理論である．ほとんどの非線形方程式は，そのままではとうてい解析的に取り扱えないのだが，分岐点近傍に限れば標準型に帰着させられ，アトラクタとその近傍の性質を解析的に取り扱える．

5. 位相縮約

振動現象に対する縮約理論には，重要なものがもう1つ存在する．**位相縮約**である．この理論によって導かれる方程式を**位相方程式**（あるいは位相モデル）と呼ぶ．位相縮約は，振動子が弱い外力を受けているときの動的応答や，複数の振動子が弱い相互作用を持つときに現れる集団挙動の解析に威力を発揮する．ここではリミットサイクル振動子が周期外力を受けているときに起こる同期現象を例に位相縮約の有用性を解説する．

リミットサイクル振動子が外力を受けている状況を次のように記述する．

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) + \epsilon \boldsymbol{p}(t). \qquad (10)$$

ここで ϵ は外力の強さ，$\boldsymbol{p}(t)$ は一般的な時間の関数で，後で周期外力を仮定する．ϵ が小さいときは，ϵ の最低次で次のような位相方程式に縮約される[3, 4)]．

$$\dot{\phi} = \omega + \epsilon \boldsymbol{Z}(\phi) \cdot \boldsymbol{p}(t). \qquad (11)$$

ここで ϕ は $0 \le \phi < 2\pi$ で定義される振動子の位相，ω は固有振動数，$\boldsymbol{Z}(\phi)$ は**位相感受関数**（phase sensitivity）と呼ばれる 2π 周期関数である．ω はリミットサイクル軌道の周期 T から $\omega = 2\pi/T$ と求まる．一方，$\boldsymbol{Z}(\phi)$ は外力に対する位相の線形応答率であり，リミットサイクル軌道とその近傍の性質によって決まる関数である．式(9)で記述されるStuart–Landau振動子に対しては $Z(\phi)$ が解析的に求まる．式(10)と形式を合わせるために $\boldsymbol{x} = (\mathrm{Re}\ w, \mathrm{Im}\ w)^\top$ と置く．Stuart–Landau振動子の位相感受関数は $\boldsymbol{Z}(\phi) = c_1(\cos(\phi+\theta_1), \sin(\phi+\theta_1))^\top$ と計算される[3, 4)]．ここで c_1, θ_1 は定数で，α と β の関数として求まる．外力として c_2, θ_2 をパラメタとする周期外力 $\boldsymbol{p}(t) = c_2(\cos(\Omega t + \theta_2), \sin(\Omega t + \theta_2))^\top$ を考えよう．すると

$$\boldsymbol{Z}(\phi) \cdot \boldsymbol{p}(t) = -c \sin(\Omega t - \phi + \theta) \qquad (12)$$

を得る．ここで c と θ は定数で，$c_1, c_2, \theta_1, \theta_2$ の関数として求まる．

式(11), (12)で表される系の挙動を調べよう．$\Delta\phi = \Omega t - \phi$ と置くと

$$\Delta\dot{\phi} = \Delta\omega + \kappa \sin(\Delta\phi + \theta) \qquad (13)$$

を得る．ここで $\Delta\omega = \Omega - \omega$, $\kappa = \epsilon c$ である．一般性を失わず，$\kappa > 0$ と仮定する．式(13)は1次元力学系であり，その解と安定性は図5のように，$\Delta\dot{\phi}$ を $\Delta\phi$ の関数として表示するとわかる．$\Delta\phi$ 軸上の矢印は $\Delta\dot{\phi}$ の符号によって決まる $\Delta\phi$ の

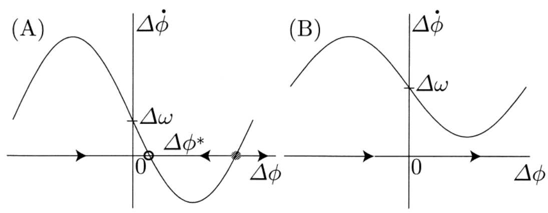


図 5 位相差の運動方程式 (13) のベクトル場.

発展方向であり，ベクトル場と呼ばれる．$\Delta\dot{\phi} = 0$ の解の有無により，定性的に異なる 2 つの状況がある．(A) の場合は安定解と不安定解が 1 組存在し，一般の初期状態に対して安定解 $\Delta\phi^*$ に収束する．このとき，振動子は周期外力の振動数と同一の振動数を持つ．このような現象を**振動数同期**と呼ぶ．一方 (B) では，そのような状態が存在せず，位相差 $\Delta\phi$ は時間と共に大きくなり続け，振動数同期は起こらない．

振動数同期の条件は，式 (13) の右辺が 0 となる解が存在することである．$|\sin(\cdot)| \leq 1$ であることに注意すれば，κ の臨界値

$$\kappa_{\mathrm{cr}} = |\Delta\omega| \tag{14}$$

が求まる．$\kappa > \kappa_{\mathrm{cr}}$ のとき振動数同期が起こる．$\kappa > \kappa_{\mathrm{cr}}$ で存在している安定解と不安定解（図 5 (A)）は，$\kappa = \kappa_{\mathrm{cr}}$ で対消滅し，これによって状態空間に定性的変化が現れる．この分岐は**サドル・ノード分岐**と呼ばれ，様々な対象に対して頻出する重要な分岐である[5)]．

振動数同期していないときの振動子の平均振動数 $\langle\dot{\phi}\rangle$ は次のように求めることができる．$\phi = \Omega t - \Delta\phi$ より，$\langle\dot{\phi}\rangle = \Omega - \langle\Delta\dot{\phi}\rangle$ である．同期してないときには $\Delta\phi$ が周期運動していることに注意する．その周期を τ とすると，$\omega < \Omega - \kappa$ のときは $\langle\Delta\dot{\phi}\rangle = 2\pi/\tau$，$\omega > \Omega + \kappa$ のときは $\langle\Delta\dot{\phi}\rangle = -2\pi/\tau$ である．式 (13) を 1 周期で積分すると

$$\tau = \int_0^{2\pi} \frac{d\Delta\phi}{\Delta\omega + \kappa\sin(\Delta\phi + \theta)} \tag{15}$$

*3) 河村洋史氏にこの原稿のチェックをしていただいた．この場を借りて感謝したい．

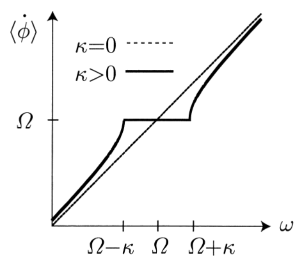


図 6 周期外力を受けたときの平均振動数.

となり，図 6 の結果が得られる．

一般のリミットサイクル振動子に対しては，式 (11) に対して，さらに平均化と呼ばれる近似[4)]を行うことにより，式 (13) の右辺が別の周期関数に置き換わった位相方程式を得る．すると後は同様の議論ができ，同期現象が同様な条件下で起こるが示せる．式 (10) の一般的な記述をそのまま扱っていては，同期の条件を示すのは困難である．

6. おわりに

力学系による現象理解の方法，つまり，対象のモデル化，分岐解析，数値解析，運動方程式の縮約（簡略化）と解析について力学系の基礎概念の紹介を交えながら解説した．

最後に，より詳しく勉強されたい方のためにいくつか文献を紹介する．力学系の入門書としては文献 5) をおすすめしたい．分岐やその標準型についてもわかりやすく紹介されている．また，振動現象に対する縮約理論に関しては文献 4) にわかりやすく解説されている[*3)]．

参考文献

1) 三池秀敏，森義仁，山口智彦『非平衡系の科学 III』講談社サイエンティフィク，1997.
2) J. Guckenheimer and P. Holmes. *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields.* Springer–Verlag, 1983.
3) Y. Kuramoto. *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence.* Springer, New York, 1984.
4) 蔵本由紀，河村洋史『同期現象の数理』培風館，2010.
5) S.H. Strogatz. *Nonlinear dynamics and chaos.* Westview, 1994.

（こおり・ひろし，お茶の水女子大学，
お茶大アカデミック・プロダクション）

パターン形成の数学



大下 承民

自然界には様々なパターンが溢れている．ゼブラフィッシュの皮膚の模様のような生物におけるパターンや，結晶粒ドメインの成長のような物質におけるパターンである．パターン形成の問題として，2種の金属A, Bからなる合金が，A金属が多い相とB金属が多い相に分離する現象，いわゆる合金の相分離現象を例にとり，その数理モデル（カーン・ヒリアード（Cahn–Hilliard）モデル），および関連する数学（変分問題・勾配流）についてなるべくわかりやすく厳密性にこだわらずに紹介したい．具体的には，カーン・ヒリアードモデルの勾配流構造について解説する．数学の言葉を借りれば，合金のパターン形成の問題は，局所密度に関する自由エネルギー汎関数の変分問題である．あるパラメーター範囲において，このパターン形成の問題が，「与えられた領域の体積を1:1に分割する曲面の中で表面積を最小にするものを求めよ」という幾何学的変分問題に帰着されることにも触れる．

まず最初に準備として，いくつかの数学的概念や用語を説明する．

1. ユークリッド空間上での勾配流

C^1 級の実数値関数 $E:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ に対し，微分方程式

$$\dot{u}(t)=-\nabla E(u(t)) \tag{1}$$

を考える．ここで，$\nabla E=(\frac{\partial E}{\partial u_1},\cdots,\frac{\partial E}{\partial u_n})$ である．(1) を**勾配系**といい，その解 $u=u(t):\mathbb{R}\to\mathbb{R}^n$ で定まる流れを E に対する**勾配流**という．$\nabla E(u)=\mathbf{0}$ となる点 u を E の**臨界点**というが，この点は (1) の平衡点になっている．$u(t)$ が (1) の解であるとき

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}E(u(t))&=g_{\mathbb{R}^n}(\nabla E(u),\dot{u})\\&=-\|\nabla E(u)\|^2\le 0\end{aligned}$$

が成立するので，$E(u(t))$ は単調非増加である．ここで，$g_{\mathbb{R}^n}(u,v)=\sum u_iv_i$ は $\mathbb{R}^n$ の標準内積，$\|\cdot\|$ はユークリッドノルムである．

任意のベクトル ϕ に対して，E の ϕ 方向の方向微分 $\left.\frac{d}{dt}E(u+t\phi)\right|_{t=0}$ は $g(\nabla E(u),\phi)$ に等しく，

$$g(\nabla E(u),\phi)\ge-\|\nabla E(u)\|\|\phi\|$$

が成立する．また，u が E の臨界点でなければ，等号成立はちょうど ϕ が $\nabla E(u)$ と逆向きのときである．つまり，$-\nabla E(u)$ は，E の u における**最急降下方向**を向いているので，勾配流は最急降下方向へ変化する流れを表している．負の符号は慣習である．

$\nabla E(u)$ は次のように特徴付けすることができる．$\psi\in\mathbb{R}^n$ とする．このとき，任意の $\phi\in\mathbb{R}^n$ に対して

$$g_{\mathbb{R}^n}(\psi,\phi)=\left.\frac{d}{dt}E(u+t\phi)\right|_{t=0}$$

が成立することと $\psi = \nabla E(u)$ は同値である．第3節でこのことを用いる．

2. 変分問題

関数に実数値を対応させる写像を**汎関数**（functional）という．例えば，関数 $u(x)$ に積分値

$$\int_0^1 \mathcal{L}(x, u, u_x)\, dx \tag{2}$$

を対応させるようなものである．汎関数の最小問題（Minimization Problems）を**変分問題**という．汎関数の極大点・極小点では，すべての方向微分が0となる．極大でも極小でもないがすべての方向微分が0になる点を鞍点または峠点という．そして，極大点・極小点・鞍点をまとめて臨界点（critical points），最小値をとる点を**（大域的）最小点**（global minimizers）という．最小点に限らず一般の臨界点を求める問題も変分問題という（「点」が関数を表していることに注意）．

(2) のような積分汎関数の臨界点は，オイラー・ラグランジュ（Euler–Lagrange）方程式と呼ばれる微分方程式の解が対応する．したがって，変分問題はオイラー・ラグランジュ方程式を解くことに帰着され，それが具体的に解ける形をしていれば，それで変分問題の解が求まる．しかしながら，独立変数の数が2つ以上になると，オイラー・ラグランジュ方程式は一般に偏微分方程式となり，具体的に解くことは容易ではない．そのような具体的に解くことができない微分方程式に対しても理論的研究は重要である．直接法（The Direct Methods）あるいは峠の定理（The Mountain Pass Theorem）に代表されるミニマックス原理（The Minimax Principle）などの変分的手法は，偏微分方程式，特に非線形問題の解の存在や定性理論において強力な道具となっている．

直接法は最小点の存在に関するもので，例えば，次節以降で解説するカーン・ヒリアード方程式の定常問題に対して適用できる．また，峠の定理は鞍点タイプの臨界点の存在に関するものであるが，詳細は省略する[7,8]．

3. カーン・ヒリアードモデル

本節では，変分問題に関連した勾配流の例として，合金の相分離現象に対するカーン・ヒリアードモデルとその勾配流構造について解説する．

汎関数に対する勾配流も，最急降下方向に変化する流れである．ただし，最急降下方向は，考えている空間内における距離（内積）に依存する．実際，変分問題に対応する勾配流では，関数空間（ある条件を満たす関数全体からなるベクトル空間）に内積を定義し，最急降下方向は，汎関数の方向微分を，変化の方向を表す方向ベクトルとの内積で表現することにより求めるのである．すなわち，任意の ϕ に対して

$$g(\psi, \phi) = \frac{d}{dt} E(u + t\phi)\bigg|_{t=0}$$

が成立するとき，この ψ を E の u における勾配といい，$\nabla E(u)$ とかく．このとき，$-\nabla E(u)$ が最急降下方向を向いている．

まず最初に，モデルの理解の助けとなるよう連続の式および拡散方程式について述べる．

3.1 連続の式

以後，常に Ω は，滑らかな境界 $\partial\Omega$ をもつ $\mathbb{R}^n$ の有界領域とする．$x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, $t > 0$ に対して $\rho(x,t)$ を物質の局所密度，$\boldsymbol{j}(x,t)$ を流束とするとき，連続の式

$$\rho_t + \operatorname{div} \boldsymbol{j} = 0 \tag{3}$$

が物質の局所保存則を表している．閉じ込め境界条件は

$$\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \tag{4}$$

である．$\boldsymbol{n}$ は $\partial\Omega$ 上の外向き単位法線ベクトルである．(3), (4) およびガウスの発散定理から $\int_\Omega \rho\, dx$ が t によらず一定であるという大域的保存則が導かれる．空間1次元，$n = 1$, $\Omega = (0,1) = \{x\,;\, 0 < x < 1\}$ の場合，(3), (4) はそれぞれ

$$\rho_t + j_x = 0, \tag{5}$$

$$j(0,t) = j(1,t) = 0 \tag{6}$$

となる．

3.2 拡散方程式

例として，1次元の拡散方程式の初期値境界値問題を考える．

$$u_t = u_{xx}, \quad 0 < x < 1,\, t > 0, \tag{7}$$

$$u_x = 0, \quad x = 0, 1,\, t > 0, \tag{8}$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 < x < 1. \tag{9}$$

(7) は，1次元の連続の式で $\rho = u$, $j = -u_x$ としたもの（フィックの法則）であり，物質のランダムな拡散を表している．(7) が，汎関数

$$E(u) = \int_0^1 \frac{1}{2}|u_x(x)|^2\, dx \tag{10}$$

の L^2 内積

$$g_{L^2}(\phi_1, \phi_2) = \int_0^1 \phi_1\phi_2\, dx \tag{11}$$

に関する勾配流になっていることを見てみる．境界条件 (8) を満たす滑らかな実数値関数 $u(x)$ を考える．このとき，任意の $\phi(x)$ に対して

$$\left.\frac{d}{dt}E(u + t\phi)\right|_{t=0} = \int_0^1 u_x\phi_x\, dx$$

$$\overset{(8)}{=} -\int_0^1 u_{xx}\phi\, dx = g_{L^2}(-u_{xx}, \phi)$$

となるので，確かに L^2 内積に関して $\nabla E(u) = -u_{xx}$ である．

次に E の臨界点を見てみる．u を E の臨界点とするとき，任意の ϕ に対して

$$0 = [u_x\phi]_0^1 - \int_0^1 u_{xx}\phi\, dx$$

が成立しなければならない．特に，$\phi(0) = \phi(1) = 0$ なるすべての ϕ に対して $\int_0^1 u_{xx}\phi\, dx = 0$ であることから $u_{xx} = 0$, $0 < x < 1$ が得られ（オイラー・ラグランジュ方程式），さらに，すべての ϕ に対して $[u_x\phi]_0^1 = 0$ より，$u_x(0) = u_x(1) = 0$ もわかる．これらから $u \equiv$ 定数となるが，この臨界点は実は E の（大域的）最小点であり，(7)–(8) の平衡解にもなっている．(7)–(8) の任意の解は E の最小化関数である定数関数（空間的に一様な状態）へ収束することが知られている．

3.3 カーン・ヒリアード方程式

合金の相分離現象を記述するモデルとして，カーン・ヒリアードは次のような自由エネルギー汎関数

$$E(u) = \int_0^1 \frac{1}{2}\varepsilon^2|u_x(x)|^2 + F(u(x))\, dx, \tag{12}$$

および初期値境界値問題

$$u_t = (-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u))_{xx}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \tag{13}$$

$$u_x = 0, \quad x = 0, 1,\, t > 0, \tag{14}$$

$$(-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u))_x = 0, \quad x = 0, 1, \quad t > 0, \tag{15}$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 < x < 1 \tag{16}$$

を導入した[2, 4]．ここで $\varepsilon > 0$, $F(u) = \frac{1}{4}(u^2 - 1)^2$, $f(u) = F'(u) = u^3 - u$ である．簡単のため，まず空間1次元の場合を考える．$u = u(x, t)$ は金属Aの相対的局所密度を表し，$\mu = -\varepsilon^2 u_{xx} + f(u)$ が化学ポテンシャルである．実際，以下の (18) より，μ が密度変化に対するエネルギー密度の変化の割合となっていることがわかる．u の平均値 $\overline{u} = \int_0^1 u\, dx$ はA金属の相対的成分比を表している．F は u が一定であるときの自由エネルギー密度であり，$u = \pm 1$ で最小値をとる．(13) は連続の式 (5) で $\rho = u$, $j = -\mu_x$ としたものであり，境界条件を考慮すると $\overline{u}$ は大域的保存則も満たす．境界条件 (14)–(15) は

$$u_x = u_{xxx} = 0, \quad x = 0, 1,\, t > 0$$

と同値である．

以下，簡単のため $u = u(x)$ の平均は0と仮定して，(13)–(15) が，平均が0の関数空間における勾配流とみなせることを確かめる．

平均が0の関数からなる空間上の $\mathring{H}^{-1}$ 内積を

$$g_{\mathring{H}^{-1}}(\phi, \tilde{\phi}) = \int_0^1 \varPhi_x(x)\tilde{\varPhi}_x(x)\, dx$$

で定義する．ただし，$\varPhi$ は

$$\begin{cases} \Phi_{xx}(x) = \phi(x), \quad 0 < x < 1, & (17a) \\ \Phi_x(x) = 0, \quad x = 0, 1, & (17b) \\ \int_0^1 \Phi \, dx = 0 & (17c) \end{cases}$$

の解，$\tilde{\Phi}$ は $\phi = \tilde{\phi}$ に対する (17a)–(17c) の解 Φ である．ϕ の平均が 0 であるとき，(17a)–(17c) が一意に可解であることは 2 回積分すればわかる．

$u(x)$ を平均が 0 で，境界条件 (14), (15) を満たす関数，$\phi(x)$ を平均が 0 の関数，$\Phi(x)$ を (17a)–(17c) の解とする．このとき，(14), (17a), (17b), (15) より，

$$\frac{d}{dt}E(u+t\phi)\bigg|_{t=0} = \int_0^1 \varepsilon^2 u_x \phi_x + f(u)\phi \, dx$$

$$= \int_0^1 (-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u))\phi \, dx \quad (18)$$

$$= -\int_0^1 (-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u))_x \Phi_x \, dx$$

$$= g_{\mathring{H}^{-1}}(-(-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u))_{xx}, \phi)$$

となり，$\nabla E(u) = -(-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u))_{xx}$ がわかった．

次に，E の定義域を平均 0 の関数空間と思ったときの臨界点 u を考えてみる．このとき，平均 0 の任意の関数 ϕ に対して

$$[\varepsilon^2 u_x \phi]_0^1 + \int_0^1 (-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u))\phi \, dx = 0$$

が成立する．これは，ある定数 λ をとると

$$[\varepsilon^2 u_x \phi]_0^1 + \int_0^1 (-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u))\phi \, dx$$

$$= \lambda \int_0^1 \phi \, dx$$

が任意の関数 ϕ に対して成り立つことと同値である．ここで，λ はラグランジュの未定乗数である*1)．したがって，u が満たす方程式は

$$-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u) = \lambda, \quad 0 < x < 1, \quad (19)$$

$$u_x = 0, \quad x = 0, 1 \quad (20)$$

であり，これは (13)–(15) の平衡解となっている．

*1) これは，上の式の ϕ に $\phi - \int_0^1 \phi dx$ を代入しても得られる．

この式は，平衡状態では化学ポテンシャルが一定であることを意味している．ただし，u 自身は空間的に一様とは限らず，これが相分離のパターンを表している．第 4 節も参照してほしい．

奇跡的に (13) では未定乗数 λ は消えてしまい，方程式が局所的になっている．これは基本的な物理的要請と考えられる．3.5 節において L^2 内積ではこの局所性が満たされないことを見る．

(13)–(15) は，局所的でかつ平均値を保存するという意味で合金の相分離モデルとして適している．

3.3.1 空間多次元版

$\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \geq 2$ の場合，エネルギーは

$$E_\varepsilon(u) = \int_\Omega \frac{1}{2}\varepsilon^2 |\nabla u(x)|^2 + F(u(x)) \, dx \quad (21)$$

で与えられ，方程式は

$$u_t = \Delta(-\varepsilon^2 \Delta u + f(u)), \quad \Delta = \nabla^2 \quad (22)$$

となる．これは連続の式で $\rho = u$,

$$\boldsymbol{j} = -\nabla(-\varepsilon^2 \Delta u + f(u)) = -\nabla \mu$$

としたものに等しい．すわわち，流束 $\boldsymbol{j}$ は化学ポテンシャル $\mu = -\varepsilon^2 \Delta u + f(u)$ の負勾配に等しい．$\mathring{H}^{-1}$ 内積も n 次元へ拡張できる．第 4 節で多次元のカーン・ヒリアードモデルと幾何学的変分問題との関連性について述べる．

3.4 アレン・カーン方程式

(12) と同じ汎関数に対して，境界条件 (14) の下で L^2 内積 (11) を考えるとどうなるであろうか考えてみよう．u を (14) を満たす関数とするとき，任意の ϕ に対して

$$\frac{d}{dt}E(u+t\phi)\bigg|_{t=0} = \int_0^1 (-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u))\phi \, dx = g_{L^2}(-\varepsilon^2 u_{xx} + f(u), \phi)$$

より $\nabla E(u) = -\varepsilon^2 u_{xx} + f(u)$ となる．よって，勾配流方程式は

$$\begin{aligned} u_t &= \varepsilon^2 u_{xx} - f(u), \quad 0 < x < 1 \\ u_x &= 0, \quad x = 0, 1, \end{aligned} \quad (23)$$

$t > 0$ となる．この方程式は双安定バランス型反

応項 $f(u)$ をもつ反応拡散方程式であり，アレン・カーン (Allen–Cahn) 方程式と呼ばれる．(23) では，必ずしも u の平均値は保存しない．

3.5 保存型アレン・カーン方程式

本節では保存型の勾配流を得るために，平均が 0 の制約条件下での L^2 内積に関する勾配流方程式を求めてみよう．

平均が 0 の制約条件下での L^2 内積に関する勾配を $\nabla E(u)$ とすると，前節と同様の議論により，平均が 0 の任意の関数 ϕ に対して

$$\int_0^1 [\nabla E(u) + \varepsilon^2 u_{xx} - f(u)]\phi\, dx = 0$$

が成立する．これは，ラグランジュの未定乗数法より，ある定数 λ をとると，

$$\int_0^1 [\nabla E(u) + \varepsilon^2 u_{xx} - f(u)]\phi\, dx + \lambda \int_0^1 \phi\, dx = 0$$

が任意の関数 ϕ に対して成り立つことと同値である．よって，

$$\nabla E(u) + \varepsilon^2 u_{xx} - f(u) + \lambda \equiv 0$$

となり，λ は $\nabla E(u)$ の平均が 0 であるように決まる．すなわち，$\lambda = \overline{f(u)} = \int_0^1 f(u)\, dx$ である．よって，勾配流方程式は $t > 0$ で

$$\begin{aligned} &u_t = \varepsilon^2 u_{xx} - f(u) + \overline{f(u)}, \quad 0 < x < 1, \\ &u_x = 0, \quad x = 0, 1, \end{aligned} \tag{24}$$

となる．この方程式は非局所的な項を含み，かつ局所保存則（連続の式）の形もしていない．

結局，(23) では局所的であるが平均値は保存せず，(24) では平均値は保存するが非局所的であり，どちらも合金の相分離モデルとしては適切でない．

4. 幾何学的変分問題と勾配流

本節では，$n = 3$, $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ とし，3 節のカーン・ヒリアードモデルと

(GV) 「Ω の体積を $1:1$ に分割する曲面で表面積を最小にするものを求めよ」

という幾何学的変分問題との関連性について解説する．

de Giorgi は，曲面の表面積を近似するため，カーン・ヒリアードとは独立に汎関数 (21) を導入した．u の平均が 0 であるという制約条件下で，カーン・ヒリアード汎関数 E_ε の最小問題を考えてみよう．この最小問題が解をもつことは $E_\varepsilon(u)$ が常に非負であるからといって自明ではない．厳密には適当な関数空間を設定して直接法を適用しなければならないのであるが，ここでは詳細は省略し，最小点 u_ε の存在は認めることとしよう．最小値は正である．なぜなら，$E_\varepsilon(u)$ の被積分関数の各項は常に非負であり，$F(u)$ は $u = \pm 1$ で最小値 0 をとることを考えると，$E_\varepsilon(u) = 0$ となるのは $u(x) \equiv \pm 1$ のときのみである．しかしながら，$u(x) \equiv 1$ と $u(x) \equiv -1$ はどちらも制約条件を満たさない．

u_ε は $\varepsilon \to 0$ のとき，どのように振る舞うだろうか．ε が小さいとき，被積分関数の初項より第 2 項のほうが重みが大きいので，ほとんどの x で $F(u(x)) \sim 0$，すなわち，$u(x) \sim 1$ または $u(x) \sim -1$ となることが予想される．また，制約条件のためそれぞれの領域の体積は近似的に Ω の体積の半分になるであろう．$u_\varepsilon(x)$ は -1 から 1 へ連続的に変化しなければならないので，$u_\varepsilon(x) = 0$ なる点が存在し，その点の近傍が領域を二分する境目となっていると考えられる．実は，この境目は幅 ε の薄い層（遷移層）となっている（図 1）．

以上のことを数学的に厳密に議論したのが Modica–Mortola である．$\frac{1}{\varepsilon}E_\varepsilon$ が (GV) に対応する汎関数に Γ–収束（ガンマ収束）すること，および u_ε がある意味で (GV) の解に収束することを示したのである[3,6]．Γ–収束の概念はやはり de Giorgi により導入されたものであるが，ここでは詳細は省略する．(21) で $\varepsilon = 0$ とした汎関数 E_0 は，ほとんどいたるところ $u(x) = 1$ または $u(x) = -1$ である任意の $u(x)$ に対して 0 となるので，適切な「極限」汎関数を得るためには，高次項（ε オーダー）を見なければならないことだけ注意しておく．

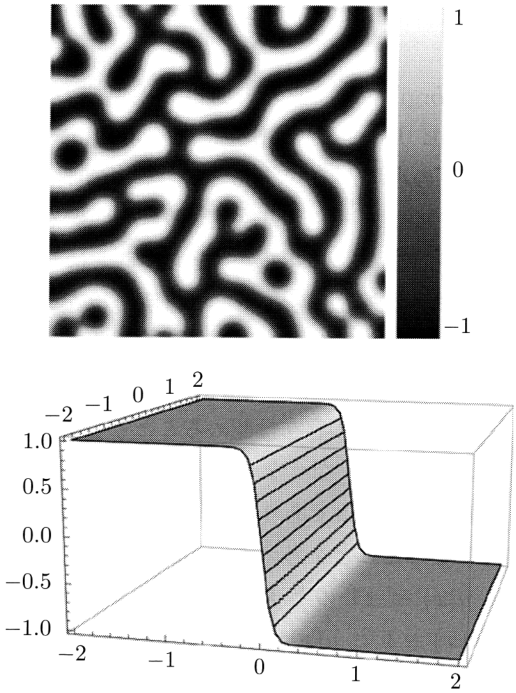


図1 $n=2$, 正方形領域における相分離のパターン（上）と遷移層のグラフ（下）.

E_ε の勾配流であるカーン・ヒリアード方程式は, Mullins–Sekerka 流という (GV) に対する幾何学的勾配流に収束し, (GV) の臨界点は平均曲率一定曲面である. カーン・ヒリアード方程式は, 動く曲面の運動方程式に対する近似とみなせるのである. 同様に, アレン・カーン方程式は平均曲率流に収束する.

5. 距離空間上での勾配流

これまで, 内積が定義されたベクトル空間上の勾配流だけ考えてきた. 実は, 内積がなく距離 d だけが定義された**距離空間**においても勾配流の概念を導入することができる.

例として, Fokker–Planck 方程式

$$\rho_t = \beta^{-1}\Delta\rho + \mathrm{div}\ (\nabla\Psi(x)\rho), \tag{25}$$

$$\rho(x,0) = \rho_0(x) \tag{26}$$

が, 自由エネルギー

$$E(\rho) = \int_{\mathbb{R}^n} \Psi\rho + \beta^{-1}\rho\ln\rho\,dx$$

の Wasserstein 距離に関する勾配流とみなせることが知られている[1,5]. (25) は, ランジュバン方程式に従う粒子に関連した確率分布に関する方程式で, Wasserstein 距離は確率測度の空間における距離である. この勾配流構造の特別な場合 ($\Psi \equiv 0$) は, 拡散方程式がエントロピーの（正の方向の）勾配流になっていることを意味しており, この解釈は 3.2 節とは全く異なるものである.

以上の例から, 同じ汎関数であっても内積の取り方によって異なる流れが得られるし, 同じ方程式であっても勾配流としての見方が一つであるとは限らないことがわかった.

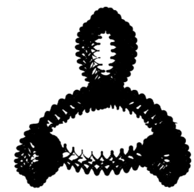
参考文献

1) L. Ambrosio, N. Gigli and G. Savaré, *Gradient flows in metric spaces and in the space of probability measures*, Birkhäuser (2008).
2) J.W. Cahn and J.E. Hilliard, Free energy of a nonuniform system I. Interfacial free energy, *J. Chem. Phys.* **28** (1958), 258–267.
3) G. Dal Maso, *An introduction to Γ-convergence*, Birkhäuser (1993).
4) P.C. Fife, Models for phase separation and their mathematics, Electron. *J. Diferential Equations* **48** (2000), 1–26.
5) R. Jordan, D. Kinderlehrer and F. Otto, The variational formulation of the Fokker–Planck equation, *SIAM J. Math. Anal.*, **29** (1998), 1–17.
6) L. Modica and S. Mortola, Il limite nella Γ-convergenza di una famiglia di funzionali ellittici. *Boll. Un. Mat. Ital.* **5**, **14-A** (1977), 526–529.
7) P.H. Rabinowitz, *Minimax methods in critical point theory with applications to differential equations*, CBMS Regional Conference Series Math. 65, Amer. Math. Soc., Providence (1986).
8) M. Struwe, *Variational methods, applications to nonlinear partial differential equations and Hamiltonian systems*, Springer (2008).

（おおした・よしひと，岡山大学理学部）

高分子多成分系の構造形成と動力学の理論

自己無撞着場理論の応用



川勝　年洋

1. はじめに

近年，物性物理学における統計力学の応用分野の一つとして**ソフトマター物理学**という研究分野が注目を集めている．ソフトマターとは，文字通り**柔らかい物質**のことであり，金属，半導体，イオン結晶などの従来の物性物理学がメインの研究対象としてきた**硬い物質**とは平衡特性および動力学特性が大きく異なる．硬い物質においては，その形状を保持している要因は構成原子間の相互作用（エンタルピー効果）であるのに対して，ソフトマターの形状は，分子集団や分子内自由度の持つエントロピーによって決定されている．このことを代表的なソフトマターである高分子を例にとってみてみよう．

多くの食品や，生体物質，プラスチック材料等の構成分子である高分子は，多数の炭素原子が共有結合でつながった連鎖構造を持つ巨大分子である．高温では炭素原子間の結合は自由に回転することができ，分子全体はフレキシブルな紐のように振る舞う．紐が直線状にピンと伸びた状態は微視的状態数が少ないため，エントロピーの観点からは不利である．従って，高分子鎖は平衡状態においては，微視的状態数を増やすために（エントロピーを高めるために）紐状構造が無秩序に折りたたまれた**ランダムコイル**の構造をとることになる．このようにエントロピーの効果によって構造が決定される点がソフトマターの特徴である．

希薄高分子溶液中での高分子鎖のランダムコイル状態は，ブラウン運動する微粒子の経路（**ランダムウォーク**）と類似の空間構造を持っていることが知られている．理想的なランダムウォークは，その一部分を拡大したときに全体の構造と統計的に同じ性質を持つという**フラクタル性**を有しており，この系を特徴づける固有の長さのスケールが存在しないことを示している．高分子の場合には，もちろんこのようなフラクタル性は，原子スケールよりもずっと大きなスケールでのみ成立する．原子のスケールよりも大きなスケールは**メソスケール**（中間スケール）と呼ばれており，高分子を構成する化学種の個別の性質には依存しない「**普遍的**」な性質が現れることが期待され，高分子の物理学を理論的に定式化する際の基礎となる概念である．図1に示すように，ミクロなモデルからメソスケールのモデルを構築するには，適切な統計力学の手法に従って原子スケールのミクロな自由度を消去することが必要である．このような操作は**粗視化**と呼ばれる．

最も単純なランダムウォークは，結晶格子上で隣接格子点に等確率で飛び移ると仮定するものであり，過去の履歴（過去の経路）には依存しないいわゆる**マルコフ性**を有した確率過程である．このような格子ランダムウォークでは，N 歩の格子ランダムウォークによって平均的に移動できる距離（移動距離の2乗の平均値の平方根を取ったもの）は空間次元によらず $N^{\frac{1}{2}}$ に比例する．この格

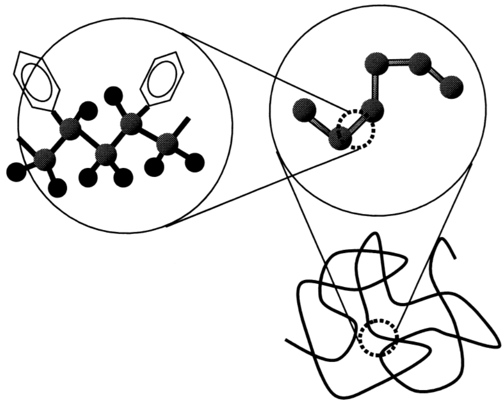


図 1　高分子鎖を原子のスケールから粗視化してゆくことで，ミクロな化学的詳細に依存しない普遍的な性質を抽出する．

子ランダムウォークを結晶格子の格子間隔よりも十分大きなスケールで粗視化して見れば，フラクタル次元が 2 のフラクタル構造になっている．このような格子ランダムウォークと同様に，高分子を多数の粒子の連鎖であると見なすモデルとしては，粒子を自由に回転できる剛体棒でつないだ自由連結鎖モデルや，粒子を弾性的なバネでつないだバネ–ビーズモデルなどがある．これらのモデルのいずれにおいても，鎖に沿って隣接する複数の粒子をひとまとめにする粗視化の操作により，伸びの確率分布がガウス分布に従う弾性バネで結ばれた**バネ–ビーズモデル**に帰着することが示せる．これは独立な多数の確率変数の和の分布がガウス分布になると言う中心極限定理の帰結である．このように，伸びの分布がガウス分布で記述されるバネで結合されたバネ–ビーズモデルは，高分子をモデル化する際の基本モデルであることがわかる．このような高分子鎖のモデルは**理想鎖**と呼ばれ，理想鎖を構成する基本単位である粗視化された粒子のことを**セグメント**と呼ぶ．

実際の高分子鎖は自分自身と重なることはない．そのようなランダムウォークは，経路どうしが交差しない**自己排除ランダムウォーク**（Self-Avoiding Walk; **SAW**）と呼ばれるものになる．このような SAW の性質を示す実在鎖では，単純なランダムウォークに相当する理想鎖に比べて以下のようないくつかの異なる性質が現れる．

(1)　N 歩の SAW によって平均的に到達できる距離は $N^{\frac{3}{d+2}}$ に比例する（平均場近似の結果）．ここで，d は空間の次元であり，$d \leqq 4$ である．

(2)　高分子を構成するモノマーユニットの化学的な性質の違いに応じて，ランダムウォークを構成する単位であるセグメントにも種々の種類を考える必要がある．

(3)　上記の性質 (2) によって，異なる種類のセグメントの間の相互作用の強さによって定まるある特徴的な長さのスケールが現れる．この長さのスケールとは，相分離によって生成される界面の厚みや相分離のドメインのサイズである．

図 2 に，ブロック共重合体という化学的組成の異なる 2 種以上の高分子鎖を共有結合でつなぐことで作られた高分子の溶融状態に出現する空間構造を示す[1)]．これらの構造は，本稿で解説する**自己無撞着場理論**を用いて計算されている．2 種の高分子鎖をそれぞれ A–鎖および B–鎖としよう．これらは互いに相手と接触することを嫌い，A–ドメインおよび B–ドメインという 2 つのドメインに分離しようとする．ところが，これら 2 種の高分子鎖は結合されているために完全に分離すること

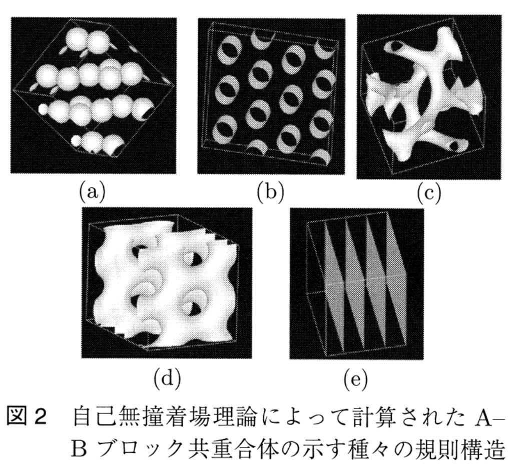


図 2　自己無撞着場理論によって計算された A–B ブロック共重合体の示す種々の規則構造の界面．(a) スフェア相，(b) シリンダ相，(c) ジャイロイド相，(d) 穴あきラメラ相，(d) ラメラ相の各相．（T. Honda and T. Kawakatsu, in *Nanostructured Soft Matter*, A.V. Zvelindovsky, ed. (Springer–Verlag, Berlin, 2007) より許可を得て転載.）

ができず，一定の特徴長さを持った周期的なドメイン構造が生成される（上記の性質 (3) である）．

高分子の自己無撞着場理論は，高分子のランダムウォークの性質をベースにして，多成分高分子系における上記の性質 (3) に帰因する空間的な不均質構造を定量的に予言するための理論である．以下では，この高分子の自己無撞着場理論について紹介する[1,2]．

2. 多成分高分子系の自己無撞着場理論の定式化

本稿の最初に強調したように，ソフトマターの物理学の本質的な課題は，系に内在する柔らかな自由度に帰因するエントロピーを評価することにある．高分子の場合のエントロピーは，ランダムコイル状になったひもの形状に関するエントロピーである．このランダムに折りたたまれた形状の自由度のことを**配位**（conformation）と呼ぶ．

高分子の配位のエントロピーを計算するには，鎖の両末端の位置を指定した上で，可能なすべてのセグメントの空間配置の場合の数を計算すればよい．理想鎖の場合には，この配置の場合の数は

$$\begin{aligned}&\mathcal{Q}_0\left(0,\boldsymbol{r}_0;N,\boldsymbol{r}_N\right)\\&\equiv\int d\boldsymbol{r}_1\cdots\int d\boldsymbol{r}_{N-1}\\&\quad\times\left[\begin{array}{l}\left\{\boldsymbol{r}_0,\cdots,\boldsymbol{r}_N\right\}\text{ が連鎖状につ}\\\text{ながっていることによる拘束}\end{array}\right]\end{aligned}\qquad(1)$$

という形に書き表すことができる．ここでは，両端のセグメントの位置を $\boldsymbol{r}_0$ および $\boldsymbol{r}_N$ に固定した上で，それ以外のすべてのセグメントについて連鎖条件（隣り合うセグメントが空間的に近い位置に存在するという条件）を満たす範囲でのすべての可能な配置に関して積分している．セグメントの連鎖に関する拘束条件は，セグメントを結ぶ結合（ボンド）の確率分布関数を導入することで表現可能である．高分子を粗視化すると，ガウス分布に従うバネで結ばれたバネ–ビーズモデルに帰着するという事実を用いれば，(1) 式は

$$\begin{aligned}&\mathcal{Q}_0\left(0,\boldsymbol{r}_0;N,\boldsymbol{r}_N\right)\\&\equiv\left(\frac{3}{2\pi b^2}\right)^{\frac{3N}{2}}\int d\boldsymbol{r}_1\cdots\int d\boldsymbol{r}_{N-1}\\&\quad\times\exp\left[-\frac{3}{2b^2}\left\{\left|\boldsymbol{r}_0-\boldsymbol{r}_1\right|^2+\cdots\right.\right.\\&\qquad\qquad\left.\left.+\left|\boldsymbol{r}_{N-1}-\boldsymbol{r}_N\right|^2\right\}\right]\\&=\left(\frac{3}{2\pi Nb^2}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left[-\frac{3\left|\boldsymbol{r}_0-\boldsymbol{r}_N\right|^2}{2Nb^2}\right]\end{aligned}\qquad(2)$$

と表すことができる．ここで，b はセグメントを結びつけるボンドの長さの標準偏差である．この (2) 式は，$d\Gamma\equiv d\boldsymbol{r}_0\cdots d\boldsymbol{r}_N$ という位相空間（配位空間）の積分を用いて

$$\begin{aligned}z&=\iint d\boldsymbol{r}_0 d\boldsymbol{r}_N\ \mathcal{Q}_0\left(0,\boldsymbol{r}_0;N,\boldsymbol{r}_N\right)\\&=\int d\Gamma\ \exp\left[-\beta\hat{H}_0\left(\Gamma\right)\right]\end{aligned}\qquad(3)$$

という形に書きかえられるので，温度 T：一定の平衡状態であるカノニカル統計における 1 本鎖の状態和に相当することがわかる．ここでは，セグメントの連鎖という空間的な拘束，すなわち配位のエントロピーの効果が，粗視化されたスケールではバネのポテンシャルというエンタルピックな効果に読み替えられている．これが，高分子でできた弾性体（ラバーやゲル）の示す**ゴム弾性**の起源である．

(2) 式において高分子鎖の配位をランダムウォークする粒子の経路と見なせば，この $\mathcal{Q}_0(0,\boldsymbol{r}_0;N,\boldsymbol{r}_N)$ は高分子鎖のボルツマン因子を可能な経路に渡って積分していることになる．このことから，$\mathcal{Q}_0\left(0,\boldsymbol{r}_0;N,\boldsymbol{r}_N\right)$ は**経路積分**と呼ばれる（ファインマンによる量子力学の定式化に現れる経路積分と概念的に同じものである）．

次に，多成分高分子混合系のような高分子の多体系に話を進めよう．セグメントの種類を表すインデックス $K=\mathrm{A},\mathrm{B},\cdots$ を導入する（A, B は分子構造を $\mathrm{A}_n\mathrm{B}_m$ のように表す際のセグメントの種別名）．多成分系においては，各セグメントペアの間にセグメント種に応じた対相互作用が生じる．相互作用が短距離相互作用の場合，粗視化さ

れたスケールではこのような対相互作用は δ 関数的に作用すると見なせる．このとき，

$$\hat{\phi}_K(\boldsymbol{r};\Gamma)=\sum_{i\in K}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) \tag{4}$$

を用いて，位置 $\boldsymbol{r}$ における K–種のセグメントの数密度を定義する．ここで，和は系の中の K–種のセグメントすべてについて取る．この定義をもちいれば，系の全相互作用エネルギーは

$$\begin{aligned}
&W\left[\left\{\hat{\phi}_K(\boldsymbol{r};\Gamma)\right\}\right]\\
&\equiv\frac{1}{2}\sum_{K,K'}\chi_{KK'}\int d\boldsymbol{r}\ \hat{\phi}_K(\boldsymbol{r};\Gamma)\,\hat{\phi}_{K'}(\boldsymbol{r};\Gamma)\\
&=\frac{1}{2}\sum_{i\in K}\sum_{j\in K'}\chi_{KK'}\delta(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)
\end{aligned} \tag{5}$$

と書ける．ここで，$\chi_{KK'}$ は K–種セグメントと K'–種セグメントの間の相互作用の強さを表すパラメタで，**Flory の $\boldsymbol{\chi}$ パラメタ**と呼ばれる．この相互作用を用いて全系の状態和を計算する必要があるが，多体相関が入ってしまうので簡単には計算できない．多体相関を断ち切って一体近似するには，**鞍点近似（平均場近似）**という手法が有効である．

(3) 式の $\hat{H}_0$ のハミルトニアンで表される理想鎖の集団に (5) 式の相互作用を追加したハミルトニアンに対応する状態和 Z を考える．δ–汎関数（引数の関数が恒等的に 0 のときだけ無限大の値をとり，それ以外では 0 となるような汎関数）のフーリエ変換

$$\begin{aligned}
&\delta\left[\hat{\phi}_K(\boldsymbol{r};\Gamma)-\varphi_K(\boldsymbol{r})\right]\\
&=Const.\int \mathrm{D}\{w_K(\boldsymbol{r})\}\\
&\quad\times\exp\left[i\int w_K(\boldsymbol{r})\left\{\hat{\phi}_K(\boldsymbol{r};\Gamma)-\varphi_K(\boldsymbol{r})\right\}d\boldsymbol{r}\right]
\end{aligned} \tag{6}$$

を用いて Z を形式的に書き換えると，

$$\begin{aligned}
Z&\equiv\prod_p\int d\Gamma_p\exp\left[-\beta\left\{\sum_p\hat{H}_0^{(p)}(\Gamma_p)+W\left[\hat{\phi}\right]\right\}\right]\\
&=\iint\prod_K\mathrm{D}\{\varphi_K(\boldsymbol{r})\}\,\mathrm{D}\{V_K(\boldsymbol{r})\}\\
&\quad\times\exp\left\{-\beta\left[-\sum_K\frac{M_K}{\beta}\ln z_K+W[\{\varphi_K(\boldsymbol{r})\}]\right.\right.\\
&\qquad\left.\left.-\sum_K\int V_K(\boldsymbol{r})\,\varphi_K(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}\right]\right\}
\end{aligned} \tag{7}$$

となる．ただし，p は高分子鎖のインデックスであり，Γ_p および $\hat{H}_0^{(p)}(\Gamma_p)$ は p 番目の高分子鎖の 1 本鎖の配位空間およびバネのポテンシャル，$V_K(\boldsymbol{r})$ は $V_K(\boldsymbol{r})\equiv w_K(\boldsymbol{r})/i\beta$ で定義される補助場，z_K はインデックス p の高分子が K–種の高分子であるときに

$$z_K\equiv\int d\Gamma_p\exp\left[-\beta\left\{\hat{H}_0^{(p)}(\Gamma)+\sum_{i=0}^{N}V_K(\boldsymbol{r}_i)\right\}\right] \tag{8}$$

で定義される K–種の 1 本鎖の状態和である．この状態和は，外場 $V_K(\boldsymbol{r})$ の中に置かれた 1 本の理想鎖の状態和であるので，多体相関の効果を考えることなく計算可能である．問題は，外場 $V_K(\boldsymbol{r})$ の求め方である．

ここで鞍点近似を適用する．熱力学極限のように系の自由度が非常に大きい場合には，中心極限定理によって物理量の平均値周りの揺らぎは無視できるようになる（平均場近似）．このとき，(7) 式の右辺の積分は，被積分関数の指数関数の引数が最小になる状態での値で置き換えることが可能となる．この結果，

$$\begin{aligned}
Z\cong\exp&\left\{-\beta\left[-\sum_K\frac{M_K}{\beta}\ln z_K+W[\{\varphi_K(\boldsymbol{r})\}]\right.\right.\\
&\left.\left.-\sum_K\int V_K(\boldsymbol{r})\,\varphi_K(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}\right]\right\}
\end{aligned} \tag{9}$$

となるので（M_K は K–種高分子鎖の本数），この系のヘルムホルツ自由エネルギーは

$$\begin{aligned}
F&=-k_\mathrm{B}T\ln Z\\
&\cong-\sum_K M_K k_\mathrm{B}T\ln z_K+W[\{\varphi_K(\boldsymbol{r})\}]\\
&\quad-\sum_K\int V_K(\boldsymbol{r})\,\varphi_K(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}
\end{aligned} \tag{10}$$

と与えられる．この鞍点近似における最小化の条

件より，

$$\begin{cases} \varphi_K(\boldsymbol{r}) = \left\langle \hat{\phi}_K(\boldsymbol{r};\Gamma) \right\rangle, \\ V_K(\boldsymbol{r}) = \dfrac{\delta W[\{\varphi_K\}]}{\delta \varphi_K(\boldsymbol{r})} \end{cases} \tag{11}$$

の2つの条件が求まる．これにより，(8) 式の1本鎖の状態和を計算する際に必要となる外場 $V_K(\boldsymbol{r})$ の具体的な形が求まった．

1本鎖の状態和 (8) 式を計算する最も効率的な方法は，(8) 式を漸化式の形に書き直すことである．(8) 式の配位空間の積分のうち最後の1セグメントの積分だけを分離することで，以下のような漸化式が得られる．

$$\begin{aligned} z_K &\equiv \int d\boldsymbol{r}_0 \int d\boldsymbol{r}_N \mathcal{Q}(0,\boldsymbol{r}_0;N,\boldsymbol{r}_N) \\ &= \int d\Gamma \exp\left[-\beta\left\{\hat{H}_0(\Gamma) + \sum_{i=0}^{N} V_K(\boldsymbol{r}_i)\right\}\right] \\ &= \int d\boldsymbol{r}_0 \cdots \int d\boldsymbol{r}_{N-1} \int d\boldsymbol{r}_N \\ &\quad \times \exp\left[-\beta\left\{\frac{3k_{\mathrm{B}}T}{2b^2}\sum_{i=0}^{N-2}|\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i|^2 + \sum_{i=0}^{N-1} V_K(\boldsymbol{r}_i)\right\}\right] \\ &\quad \times \exp\left[-\beta\left\{\frac{3k_{\mathrm{B}}T}{2b^2}|\boldsymbol{r}_N-\boldsymbol{r}_{N-1}|^2 + V_K(\boldsymbol{r}_N)\right\}\right] \\ &= \int d\boldsymbol{r}_0 \int d\boldsymbol{r}_N \int d\boldsymbol{r}_{N-1} \\ &\quad \times \mathcal{Q}(0,\boldsymbol{r}_0;N-1,\boldsymbol{r}_{N-1}) \\ &\quad \times \exp\left[-\beta\left\{\frac{3k_{\mathrm{B}}T}{2b^2}|\boldsymbol{r}_N-\boldsymbol{r}_{N-1}|^2 + V_K(\boldsymbol{r}_N)\right\}\right]. \end{aligned} \tag{12}$$

最後の式で $\mathcal{Q}(0,\boldsymbol{r}_0;N-1,\boldsymbol{r})$ の部分を $\boldsymbol{r}_{N-1}=\boldsymbol{r}_N$ の周りでテイラー展開し，$\int d\boldsymbol{r}_{N-1}$ の積分を実行すれば，最終的に

$$\frac{\partial}{\partial N}\mathcal{Q}(0,\boldsymbol{r}_0;N,\boldsymbol{r}_N) = \left[\frac{b^2}{6}\nabla^2 - \beta V_K(\boldsymbol{r}_N)\right]\mathcal{Q}(0,\boldsymbol{r}_0;N,\boldsymbol{r}_N) \tag{13}$$

という拡散方程式に類似の方程式が得られる（量子力学との対応で言えば，(13) 式はシュレディンガー方程式に対応する）．

(13) 式で与えられる経路積分は，高分子鎖の統計的性質を平均場近似の範囲で正しく記述しているので，すべての物理量はこの経路積分から計算可能である．例えば，セグメント濃度分布 $\varphi_K(\boldsymbol{r})$ は

$$\varphi_K(\boldsymbol{r}) = C\sum_{i\in K}\int d\boldsymbol{r}_0 \int d\boldsymbol{r}_N \mathcal{Q}(0,\boldsymbol{r}_0;i,\boldsymbol{r}) \times \mathcal{Q}^{\dagger}(i,\boldsymbol{r};N,\boldsymbol{r}_N) \tag{14}$$

によって計算できる．ここで，$\mathcal{Q}^{\dagger}(i,\boldsymbol{r};N,\boldsymbol{r}_N)$ は鎖の $i=N$ の末端から計算される経路積分であり，C は規格化定数である．(14) 式で計算される $\varphi_K(\boldsymbol{r})$ は (11) 式の定義と矛盾してはいけない．この条件は自己無撞着条件と呼ばれ，一般には数値計算による繰り返し法で解かれる．

3. 自己無撞着場理論の応用例

3.1 平衡構造の探索

ブロック共重合体のような多成分高分子系の平衡状態は，(13) 式の経路積分を (11) および (14) 式と矛盾がないように（自己無撞着に）解くことで得られる．この際，最終的な相分離の構造としては，いろいろな結晶対称性を持った構造が候補に挙がるが，それらの中で (10) 式の自由エネルギーを最小にするものが真の平衡構造に相当する．図2に示したブロック共重合体の規則構造は，このようにして計算されたものである[1]（ただし，(d) の穴あきラメラ構造だけは自由エネルギーを最小化させる最安定構造ではなく，自由エネルギーの極小に対応する準安定構造である）．

図2に示されたブロック共重合体の平衡ドメイン構造の界面がいずれも，数学的には**平均曲率が一定の曲面**（constant mean curvature surface）に非常に近いと言うことは特筆に値する．微分幾何の方法を用いると，界面を微小に変形させたときの界面面積の変分が平均曲率に比例することが示せる[3]．したがって，界面が平均曲率一定の曲面になっているということは，界面を移動させようとする力が界面の面積の増加分に比例しており，

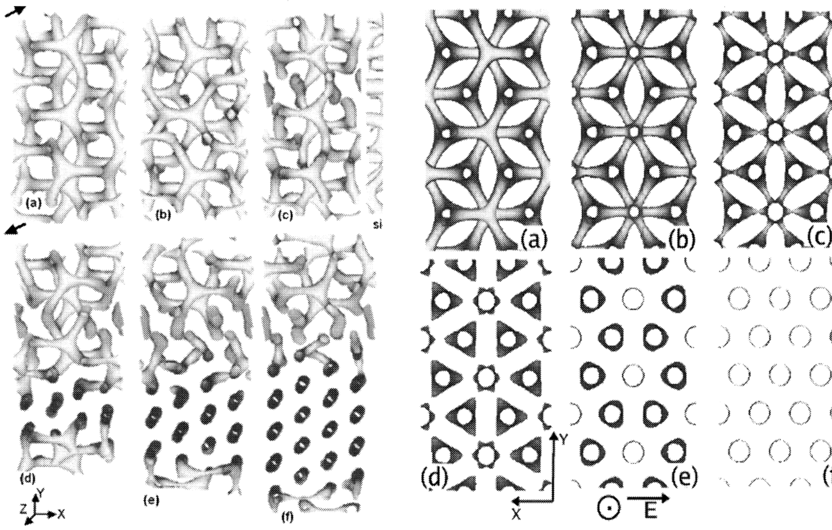


図 3 ブロック共重合体のジャイロイド構造に外場を掛けたときのシリンダ構造への転移.
（左図）ずり流動場を印可した場合（T. Honda and T. Kawakatsu, *Macromolecules*, **39**, 2340–2349 (2006) より許可を得て転載，© 2006 American Chemical Society）.
（右図）直流電場を印可した場合（D.Q. Ly, T. Honda, T. Kawakatsu, and A. Zvelindovsky, *Macromolecules*, **40**, 2928–2935 (2007) より許可を得て転載，© 2007 American Chemical Society）.

その力が至るところで釣り合っていることを示している．このような力は界面張力として知られており，界面を持つ系を駆動する力の主たる要因になっている[4]．

3.2 動力学への拡張

自己無撞着場理論の動力学への拡張は最近始まったばかりである[5]．最も簡単な動的自己無撞着場理論では，各セグメント種の化学ポテンシャルの勾配によって濃度場 $\varphi_K(\boldsymbol{r})$ の拡散が駆動されるという「**拡散のフィックの法則**」を仮定する．この結果，$\varphi_K(\boldsymbol{r})$ の時間発展は保存量の従う連続の式とフィックの法則を用いて

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi_K(\boldsymbol{r},t) + \nabla\cdot\left[-L_K(\boldsymbol{r})\nabla\mu(\boldsymbol{r},t)\right] = 0 \tag{15}$$

と表される．ここで，$\mu_K(\boldsymbol{r},t) \equiv \delta F/\delta\varphi_K(\boldsymbol{r})$ は K–セグメントの化学ポテンシャル，$L_K(\boldsymbol{r})$ は場所に依存する運動係数である．化学ポテンシャル $\mu_K(\boldsymbol{r},t)$ は (10) 式の自己無撞着場理論で求められた自由エネルギーを濃度場 $\varphi_K(\boldsymbol{r})$ で汎関数微分することで求められる．

(15) 式の拡散方程式に外部流動場や外部電場を加えることで，相分離のドメイン構造の種々の相転移現象を調べることができる．図 3 に示すのは，図 2 (c) のジャイロイド構造にずり流動および直流電場を掛けたときのシリンダ相への転移の例である．流動場と電場の場合で，転移の経路が異なっていることがわかる．流動場の場合には，ジャイロイド相とシリンダ相が共存しているが，電場の場合には系全体でほぼ均一に転移が生じている．これは，流動場が流動方向と速度勾配の 2 つの方向を持つのに対して，電場が単一の方向しか持たないことに帰因していると考えられる．

4. 結語

本稿では，高分子の自己無撞着場理論の基本的枠組みを紹介し，平衡構造と動力学のそれぞれの

問題への適用例を紹介した．平衡構造の計算に関しては自己無撞着場理論は大変強力で，現在では幅広い応用がなされている[1,2]．一方の動力学の問題への適用はまだ緒についたばかりであり，その発展が期待される[5~7]．特に，(15) 式のような拡散によって駆動される動力学だけでなく，高分子鎖のブラウン運動や絡み合い効果を取り入れたシミュレーションも始められており[5]，この方向での今後の発展が期待される．

謝辞

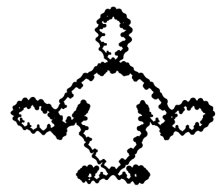
本稿で紹介した動的自己無撞着場理論の計算例は，(株) 日本ゼオンの本田隆氏との共同研究によるものです．シミュレーションには，経済産業省の産学連携プロジェクト「高機能材料設計プラットフォーム」(通称「土井プロジェクト」) で開発されたOCTAシステムに搭載された動的自己無撞着場理論のシミュレータであるSUSHI (Simulation Utilities for Soft and Hard Interfaces) が使用されています．

参考文献

1) T. Honda and T. Kawakatsu, in *Nanostructured Soft Matter*, A.V. Zvelindovsky, ed. (Springer-Verlag, Berlin, 2007).
2) T. Kawakatsu, *Statistical Physics of Polymers–An Introduction*, (Springer-Verlag, Berlin, 2004) (川勝年洋,『高分子物理の基礎』(臨時別冊・数理科学) (サイエンス社, 2001)).
3) S.A. Safran 著, 好村滋行訳,『コロイドの物理学』, (吉岡書店, 2001).
4) 太田隆夫,『界面ダイナミクスの数理』, (日本評論社, 1997).
5) T. Kawakatsu, in *Understanding Soft Condensed Matter via Modeling and Computations*, W.-B. Hu and A.-C. Shi, eds., (World Scientific, Singapore, 2010).
6) T. Honda and T. Kawakatsu, *Macromolecules*, **39**, 2340–2349 (2006).
7) D.Q. Ly, T. Honda, T. Kawakatsu, and A. Zvelindovsky, *Macromolecules*, **40**, 2928–2935 (2007).

(かわかつ・としひろ，東北大学大学院理学研究科)

ソフトマターとは何か



好村　滋行

1. ソフトマターとは

ソフトマターという名称は，比較的最近，定着した言葉であり，国内でもソフトマターに関する書籍が相次いで出版されている[1~4]．化学の分野ではソフトマテリアルと呼ばれることも多い．ソフトマターとは，高分子，液晶，両親媒性分子，コロイド，エマルション，生体物質，ガラス，粉流体などの物質群に対する総称である．これらの物質に共通する性質は文字通り柔らかいことであるが，そのような特徴はなぜ生まれるのであろうか．

ソフトマターは一般にその構成分子が大きいため，10～1000 nm 程度のメソスコピックな内部構造を自発的に形成する点に重要な特徴がある．例えば，高分子溶液中の高分子鎖のフローリ半径，コロイド粒子や脂質二重膜ベシクル，マイクロエマルションのドロプレットの大きさなどはすべて数十から数百 nm 程度である．エアロゾル中の泡の大きさや，ブロックコポリマーのミクロ相分離構造のスケールも同様である．一般に，物質の内部構造の長さスケールを L とすると，その（エントロピー的な）剛性率はおよそ $G \sim k_{\mathrm{B}}T/L^3$ で与えられる．ここで，k_{B} はボルツマン定数，T は温度である．通常の固体の場合，L として典型的な原子間距離を選ぶと，G の値はおよそ 10^{10}～10^{11} Pa 程度となる．それに対して，例えばコロイド粒子が周期的に配置したコロイド結晶の場合，粒子間の距離 L が原子サイズよりもはるかに大きいため，G は 1～100 Pa と圧倒的に小さくなる．したがって，ソフトマターは力学的に柔らかい応答を示す．

ソフトマターにおけるメソスコピックな内部構造の存在は，当然その動的性質にも大きな影響を及ぼす．およそ粒子間距離を拡散するのに要する時間を，仮にその物質の特徴的な時間 τ と考えれば，粒子の拡散定数を D として $\tau \sim L^2/D$ となる．単純液体では $\tau \sim 10^{-12}$ s なので運動が瞬時に緩和してしまうが，コロイド結晶では τ が 10^{-3}～1 s となり，他のソフトマターと同様に，非常にゆっくりとしたダイナミクスを示す．言い換えると，ソフトマターは小さな外場で大きな構造変化を示す非線形性と，著しく遅いダイナミクスにともなう非平衡性を兼ね備えている．このため，ソフトマターは非線形・非平衡物理学における恰好の研究対象と考えられており，基礎および応用の両面から大きな注目を集めている．

新しい物質科学としてのソフトマター研究は，物理，化学，生物，工学などにまたがる学際領域研究として位置づけられる．特にほとんどの生物はソフトマターで構成されているため，生命現象の物理的解明を究極的な目的とした研究が行われつつある．一方で，様々なソフトマターの応用への展開には目を見張るものがあり，電子産業，情報技術産業，食品や化粧品産業など多岐にわたっている．ソフトマターが 21 世紀の科学で重要な役割を果たすことは間違いないだろう．

2. ソフトマターの歴史

歴史を紐解いてみると，ソフトマターの源流は 150 年近く前のイギリスの化学者グラハムが考え

た「コロイド」に辿り着く．彼は固体でも液体でもない，もしくはその両方の性質を兼ね備えたような物質を「コロイド」（膠質）と呼び，「クリスタロイド」（結晶質）と区別した．その後，コロイドの研究は主に化学の一分野として発展し，例えばドイツの化学者シュタウディンガーは高分子の概念に到達する．

一方，20世紀の物理学は量子力学の発見とともに幕をあけ，それを基礎にした固体物理学が飛躍的に発展して，人類の生活様式も一変させてしまった．そのような流れの中で，今日ソフトマターと見なされるような物質は，実験的にも理論的にも取扱いが難しい対象であるとみなされていた．しかし，1970年代に相転移における臨界現象が本質的に解明されたことにより，物理学者は「普遍性」や「スケーリング」などの新しい物質観を獲得することになる．フランスの物理学者ド・ジャンは相転移の理論で培われた新しい視点で高分子や液晶を捉え直し，これらの物質も美しい性質や法則性を示すことを明らかにした．この画期的な業績が評価されて，彼は1991年にノーベル物理学賞を受賞する．ちなみに，ド・ジャンのノーベル賞講演のタイトルは「ソフトマター」であった．

ド・ジャンの研究スタイルに触発された多くの物理学者は，必ずしも高分子や液晶などを個別に研究するのではなく，むしろソフトマターと呼ばれる物質群に共通する普遍的な性質を探究してきた．もちろん個々の物理学者の研究態度がすべて同じであったわけではないが，過去20年のソフトマター物理学はこのような背景の下で世界的に発展を続けてきた．

3. ソフトマターの数理科学的側面

上で述べたように，ソフトマター物理は臨界現象の理論の影響を強く受けており，スケーリングと呼ばれる議論がしばしば用いられる．一つの例として，高分子溶液と紐状ミセル溶液の粘性を考えてみよう．高分子はモノマーと呼ばれる繰り返し単位を化学的に重合させた細長い紐状の分子であるのに対して，紐状ミセルは界面活性剤などの両親媒性分子が水中で自己会合した細長い集合体であるが，分子の出入りは自由であり，構造の組み換えも可能である．どちらの場合でも，溶液の粘性 η と濃度 ϕ の間には $\eta = C\phi^{\alpha}$ という関係が成り立つ．これをスケーリングの関係と言う．注目するスケールに対応して現象を的確に記述するモデルを構築することによって，高分子であれば分子種によらず $\alpha \approx 3.9$，紐状ミセルでも分子種によらず $\alpha \approx 3.7$ と理論的に予測される[3]．これは，溶液中の高分子と紐状ミセルがよく似た振舞いを示すが，それらのダイナミクスにおいて少し異なる緩和機構が含まれていることを意味する．ソフトマター物理ではこのような普遍的な指数の値に注目し，背後に存在する物理的なメカニズムを探ろうとする．一方，分子種の個性は高分子でも紐状ミセルでも係数 C に反映される．指数 α と係数 C は車の両輪の関係にあり，両者が解明されて初めて注目する物質の全体像が明らかになる．

一方，スケーリングの議論は物理現象の本質を捉えているものの，定量性などが不十分であるという批判があるのも事実である．しかしながら，川勝年洋氏によって本特集に取り上げられている高分子の自己無撞着場理論などを用いれば，実験結果とも定量的な比較が可能であり，精密科学と言ってよいレベルの結果が得られることがわかりつつある．

参考文献

1) 今井正幸：『ソフトマターの秩序形成』，シュプリンガー・ジャパン (2007).
2) 田中文彦：『ソフトマターのための熱力学』，裳華房 (2009).
3) T.A. ウィッテン，P.A. ピンカス（好村滋行，福田順一訳）：『ソフトマター物理学』，吉岡書店 (2010).
4) 土井正男：『ソフトマター物理学入門』，岩波書店 (2010).

（こうむら・しげゆき，首都大学東京大学院理工学研究科）

物理と数学の相互作用と共同発展

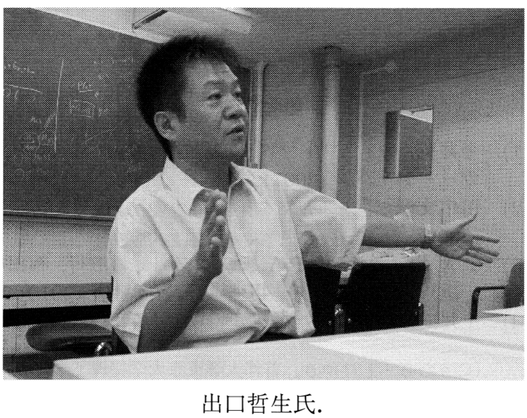
出口 哲生（聞き手：編集部）

1. 物理学に応用される数学

——今回の特集では，多くの数学的手法が取り上げられていますが，これらの手法の多くは，もともと数学の一分野であるものが多いかと思われます．物理学ではどのようにして応用されていくようになったのでしょうか．

そうですね．数学が出発点になった場合と物理学が出発点になった場合の2つのケースが考えられますが，調べてみると，本当のところはどちらが先とも言い難い複雑なことが多いみたいですね．

例えば，ランダム行列は，最初の出発点は1920年代の数理統計の分野ですが，ウィグナーによって原子核の励起エネルギーの準位分布へ応用されたことがきっかけで研究が広がり，ダイソン，メータなどにより研究が深められました．1980年代以降，メゾスコピック系で不純物がある場合の電気伝導の理論に，最近では，1次元格子上のダイナミカルな非平衡模型に，それぞれ応用されています．


出口哲生氏．

ランダム行列の場合は最初の出発点は数学ですが物理学と交流していくうちに，だんだんいろいろな場面に応用が広がっていったケースではないかと思います．今では可積分系とも関係して，相当に幅広い応用があります．

特集で取り上げられているテーマでは，“可積分系とベーテ仮説”は，部分的には量子群などの新しい数学を導きましたが，全体としてはまだ多くの領域が残されています．1990年頃にラングランヅ予想で有名な数学者のラングランヅ（R. Langlands）がストリング仮説を証明しようとして取り組みましたが，4年ほどでやめてしまったという経緯もあります．ストリング仮説とは，量子ハイゼンベルグ鎖（XXX鎖）などベーテ仮説の方法で解ける模型の固有状態の数え上げを行う経験的方法のことで，可解模型の固有状態の完全性を証明する上で重要です．このようにベーテ仮説の場合では数学が先というわけではなく，むしろ今後に新しい数学を導く可能性が高いと思います．

作用素代数は，最初は量子力学の基礎から始まったもので，公理などを使って量子力学の基礎をき

ちんと数学的に表現しようとすると，フォン・ノイマン環などの代数が必要になってきたという流れかと思います．もしかしたら他にも古い起源があるかもしれませんが，学問として深く研究されるきっかけになったのは，量子力学の誕生にあったのだと思います．さらには，20 世紀中盤に入ると，相転移を記述する上で作用素代数の有用性が明らかになり，統計力学のリー・ヤンの定理以降の発展の記述などに用いられています．

作用素代数から新しい物理が導かれた例は，現在のところ物理分野で非常に良く知られたものは見当たりません．ただし，量子力学の新しい不確定性関係が小澤正直先生によって導かれていますが，これは作用素代数の応用と考えられるので，実験で検証されるようになれば，作用素代数は物理で重要であると認められることでしょう．

パターン形成に関しては，一番最初は生物か化学物理が出発点ではないかと思います．例えば，神経パルスではフィッツヒュー・南雲方程式，また，合金の相分離現象ではカーン・ヒリヤード方程式が知られています．これらの方程式は数学者によって深く研究されました．ただし，最近約 30 年間のパターン形成の研究では，スピノーダル分解という高分子の相分離過程の現象が統計物理の理論や実験によって，物理分野で盛んに研究されました．

パターン形成，特に相分離の時間発展を記述する理論では，自己無撞着理論と太田・川崎理論などのアプローチが知られています．第一原理の物理の立場からは自己無撞着理論が好まれ，一方，太田・川崎理論は日本では 10 年以上前に本質的な発展は終わったと思われていました．ところが 2010 年の 5 月に北米の研究会に行ってみると，若い数学者が何人も太田・川崎理論に真剣に取り組んでいました．実は，むしろ数学的研究にふさわしい理論だったのです．今後，数学の中で大きく発展するという印象を受けました．

Self-Avoiding Walk（自己排除的酔歩）は，フローリーという米国の有名な学者（ノーベル化学賞を受賞）が，1940 年代末に，現実の高分子はランダムウォークではなくて Self-Avoiding Walk であり，排除体積をもつ特別なランダムウォークであると指摘しました．太さ（排除体積）をもつことによって反発力が生じ，高分子鎖の平均的大きさが広がり，ランダムウォークとは違う性質をもつことを定性的な理論で示しました．Self-Avoiding Walk の数学的研究が本格的に始まるのは，1960～70 年代以降のことで，これは物理の方が先行している例として理解できるでしょう．

力学系はやはり数学での歴史が長く，現在も数学に近い分野であると思いますが，しかし，物理分野の研究者も数多く引き付けています．例えばカオスなどはポアンカレが予言していますが，多くの人に注目されるようになったのは，80 年代にカオスのシミュレーションが具体的に実行できるようになってからではないかと思います．また，今回の特集で執筆されている郡宏さんは非線形振動子の研究が専門です．非線形振動子の数学的研究も歴史が長く重要ですが，統計物理学あるいは応用数学の分野でも研究され，例えば蔵本由紀先生の研究が国際的に知られています．

――数学から物理に，また物理から数学に，発展が互いに行き来するということなのですね．

そうですね．例えば，ランダムウォークは，フランスのバシュリエ（Bachelier）が 1900 年頃，アインシュタインの論文より前に，株価の乱雑な変動をテーマに学位論文を書いたらしいです．しかし，ランダムウォークが注目されたのはそれがきっかけではなく，ブラウン運動に関するアインシュタインの 1905 年の論文が重要なのでした．ただし，Fokker-Planck 方程式はレイリーや古くはラプラスによっても導かれていたようで，誰が何の意味で最初なのかは，慎重に文献を調べる必要があります．

しかし，何と言っても，アインシュタインのブラウン運動の理論は物理学では重要です．それま

で，原子の存在は仮説でしかなかったわけですが，この理論によって原子論を実験的に検証することが可能となりました．そして 1908 年頃にペランの一連の実験によりブラウン運動の理論は実証され，原子論も一般に認められるようになりました（ノーベル賞受賞）．また，アインシュタインの論文がきっかけとなって，ランジュバン方程式という確率微分方程式が導入され，確率過程などの研究へ応用されていきました．統計物理系でもウーレンベックの研究，さらにはオンサーガーの線形応答の相反関係式（ノーベル賞受賞）を経由して，その流れは久保公式などの線形応答の統計力学的理論へと発展していきます．一方，数学では 1940 年代に伊藤積分などの研究があり，それらが今度は金融工学に応用され，そして最近また経済物理として物理に入ってくるわけです．ですから，行ったり来たりするうちに，だんだん大きくなってくるのだと思いますし，また，そのような分野はいい分野であると言えるでしょう．

昔は単純に，最初に物理で研究テーマが見つかってそれが数学で研究される，と私は思っていたのですが，以上のように歴史を調べるとそうでもなくて，むしろ一番最初は数学者が見つけた場合も多いのです．ただし，物理的実体が分かったほうが研究はうまく進む，という傾向があるような気がします．実験的手法が可能になるためか，物理の研究テーマになると研究者の数も増えて研究が盛んになる，という印象があります．

このように，一つの研究テーマが数学と物理の相互作用を経由して次第に発展することは，案外と多いのではないでしょうか．

2. 物理学が要請する数学

――特集中で取り上げられている数学的手法は，最初にお聞きしましたようにもともと数学の一分野であるものが多いかと思いますが，逆に物理の研究で必要になって，数学の手法を物理から開発するということはあるのでしょうか．

物理の方では，この問題を解決したい，というモチベーションは当然あります．

例えば，量子力学の基礎付けは非常に難しい問題で，特に観測問題など，現在でも未解決な部分が多く残されています．標準的な量子力学の解釈としては，1920 年代にボーアらによるコペンハーゲン解釈などが確立されていますが，量子暗号や量子計算機，量子力学的絡み合い，そしてより一般的には量子力学の基礎問題などが最近脚光を浴び，活発に研究されています．

研究テーマが物理から数学へ移り，それが物理に返ってきてもっと発展する場合に，新しい数学的手法が必要になるのかもしれません．物理学が要請する数学というのは，そういう意味でいうと，物理学が今まで表現できなかった新しい現象や状況を表現できるような道具がほしい，そういうことを解決する手段がほしい，ということだと思います．現在の物理学が要請する「新しい数学」はたくさんあります．

先にも述べましたが，流れで言うと，理論物理学の研究テーマが，20 年か 30 年ほど後に数学の題材になるという例が多いようです．物理現象などを実験やシミュレーションで調べ，大体の様子がわかってきた後に，最終的に数学の中で研究されて理論的な詰めが与えられる，という場合が典型的で理想的な発展であると思います．

可解模型の研究では，様々な数学的手法を応用する場面が多いのですが，例えば，ベーテ仮説の方法では，導かれた積分方程式を解く場合に，ウィーナー・ホップ法がしばしば用いられます．他には，リーマン・ヒルベルト問題や特異積分とか，可解模型の研究では一番最後に必要になることが多いです．ただし，これらの方法は，一般的な物理の研究ではあまり必要でないと思います．一般的な理論物理の研究では，計算機で調べることが多いですから，数学はあまり必要とされないという面もありますね．ただし，将来は，言葉として新し

い数学が必要となる可能性は高いと思います．

ところで，物理が数学に貢献できる場面は主に2つあって，一個目は，良い具体例を見出すことです．一般論をつくるというより，具体例をつくることで非常に貢献できるのではないかと思います．もう一つは研究の意義付けあるいは動機づけで，量子力学の基礎のように，「このような数学がほしい」と主張することです．ニュートンにまで遡れば，運動方程式を解く必要があってニュートンが微積分を作ったと言えますが，ニュートンは巨人ですし，そこまでいくと特別な存在でしょうから….

ですから，物理で何か新しい数学的手法が必要になってきたときに，何か具体例をつくることができたら立派なものだと思います．

理論物理学では今まで研究されたことのないような問題に出会うことが多く，最近の例では，切れた紐でつくった「結び目」の概念があります．タンパク質の折り畳み過程の途中にスリップノットという，ほどけるような結び目が出現する場合があります．それがどうやってできるかが分かると，タンパク質が折り畳まれる経路が明らかになるのですが，問題は，端が切れた結び目を記述する理論がまだ存在しないのです．それで，トポロジーの専門家に，このような理論は作れませんか，と頼んでみるわけです．閉じたひもの結び目の数学的理論は完全で美しいのですが，実際には切れ目の入った有限の長さのひもを結んでつくった結び目の数学的理論が必要な場合が多いのです．

現実との交流の中から発展した例として，最近，太さをもつ物理的な結び目の理論が導かれました．数学の結び目理論は，太さがゼロで完全な細い線で良かったわけですが，実際の現象では太さが重要な場合があり，「物理的結び目」の理論が必要になったのです．すでにトポロジーの数学雑誌にも掲載され，現在でも発展しています．

3. 数学を習得するには

――数学と言えば論理的に構築されたもので，本気で習得しようとするとかなりの時間を要するかと思います．ところで，物理への応用ということになると，どういったことをポイントにして勉強するとよいでしょうか．

私は，本に書かれていることを全部まじめに読む必要はあまりないと思います．具体的で簡単な例を理解して，お終いにしても良いと思います．これが私のアドバイスです．高校生が受験参考書を買って端から端まで読むというのはいいのですが，研究者がある分野を勉強する場合には，具体例から入ってまず最重要な例を理解するのがポイントではないかと思います．物理の人が数学の勉強をするなら，典型的な具体的応用例を一つ勉強して理解できればそれで十分，ということです．

岡潔の書いたものの中に，「物理の研究は指物師的だ」と言った部分があったと思います．つまり，物理ではあるもの（数学）を現象に当てはめるだけで終わっているのではないかというわけです．私は数理物理を研究しているので，自分としてはもう少し数学を掘っていこうと思うのですが，一般的な理論物理の研究では，岡潔の言ったことを率直に受け止めて，物理の研究の中で新しい数学的理論を掘り下げる必要はなく，もしそうだったら，誰か適当な数学者の友人を探して，助けてもらうのが良いと思います．

良い友人をもつことは大事ですね．国際会議などでも，結局は違う分野に関して良い友人をもつことが目的のようにも思いますし，まともに論文を読んでも分かりませんが，話して一緒に議論するとことにより，もし問題意識を共有できるようになれば，共同研究も可能でしょう．

日本では，昔は，一つのことをしっかりと追及することが基本と考え，専門分野を究めていく姿勢に徹することが勧められたと思いますが，現在は従来ほどに厳密にしなくても良いのではないか

と思います．

こういうことは，大学生にはあまり奨励したくないことですが，博士課程にまで進学している人には，様々な分野に知識を広げる目的のためには良い方針なのではないかと思います．

それと，私は関連分野の知識を広げる点では，国内より海外に出た方がやり易いかなという印象があります．日本は最初に学問を輸入して研究を始めたので，型として学ぶのが精一杯で，それを消化してから次へいこうとなると，なかなか型から外に出られないのではないかと感じます．

一方，最初に数学の手法を物理に応用する人は，相当の雑多な知識を知っていて，無駄な勉強もたくさんやっている必要があるでしょう．解決可能な良い研究テーマが与えられれば，誰でも研究できるとも言えます．しかし，解決できそうで誰も研究していない重要な問題を見つけることは，一般には難しいことで，幅広い知識がないと見つけられません．その意味では，無駄こそが新しい創造への道だと思いますし，たくさん勉強してほしいとも思います．

4. 影響を受けたこと

——先生が研究者になるに当たって影響を受けたことをお聞かせ下さい．

これは，連載「物理の道しるべ」である程度は書いていますので（2010 年 9 月号掲載），それを読んでいただけたらと思いますが，書いていないこととして，子供時代に見ていた鉄腕アトムなどのアニメの影響は受けているなと思いますね．その当時テレビを見ていると，科学をすると未来は明るい，といったイメージがありました．

それと，私は中学受験をしたのですが，そのときに一番できなかったのは算数でした．普通に考えると，なぜそういう人が数理物理をやりたいのか，となるわけですが，私の場合，むしろ逆に，できないからできるようになりたいという気持ちで勉強しているうちにはまってしまったようです．

5. メッセージ

——今後，研究者を目指す方や学生さんへのメッセージをお願いします．

最も言いたいことは，自分の好きなことを追求してほしい，ということです．運がよければ，好きなことをして生活していける時代ですから，自分の好きなことを伸ばしていくことができれば，それが一番良いのではないかと思います．

また，日本全体として見てみると，様々な分野に優秀な人が進んで育っていかないと，文明社会として健全な発展が望めません．さらには国際社会の中で先進国としての地位を保つことも難しい，という現実もあります．

一方，私の世代までは，助手になればそれでパーマネント職だったのですが，今思えばそれはとても恵まれたことでした．今の 20 代や 30 代の人たちは，研究生活の少なくとも最初の数年間は任期つきのポストしかありません．それでも研究者をやっていくという強さをもたなくてはいけません．他の職種が終身雇用制度を維持し続ける場合，相対的には厳しい状況です．その中で優秀な人を残すため，学会全体でもいろいろ工夫をしないといけないと思います．

博士課程まで進学して勉強した場合には，社会が負担した費用も大きく，そのような人を育てることは決して簡単ではありません．自分の特性をよく考えて，積み重ねた学歴を大切にして活かして欲しいし，社会全体も高学歴の若者を尊重すべきです．世論をうまく誘導したいものですね．

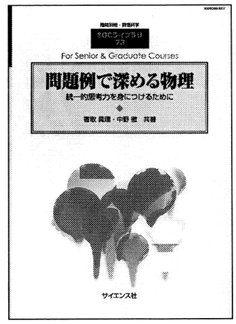
——本日は貴重なお話をお聞かせ下さり，誠にありがとうございました．

(2010 年 8 月，
お茶の水女子大学茗荷谷キャンパス研究室にて)

（でぐち・てつお，お茶の水女子大学理学部）

問題例で深める物理
統一的思考力を身につけるために

香取眞理，中野徹共著，B5 判，160 頁，本体 1981 円，サイエンス社



本書の読者の中には色々な形でいわゆる「物理数学」の教育に携わっている方も多いのではないかと思うが，どうやれば学生諸氏に興味をもって聞いてもらえるか，皆さんそれぞれに苦労されていることと思う．大学基礎レベルの物理数学といえば，常微分方程式，ベクトル解析，複素関数論の基礎，フーリエ解析，偏微分方程式の基本的な議論等となるが，これを単純かつ機械的に教えるのは，私にも経験があるが，やってみるとそれなりにつらい．教えるほうがある程度楽しめるところがないと，やはり力も入らず，結局聞いてる学生諸氏の興味もいま一つということになる．そこで，教師は多少なりとも頭を捻って，面白い話題を織り込もうとするのである．拡散方程式を講義するとき，経路積分の話題をチラッと出してみたりするわけである．

そんな観点からこの香取・中野共著『問題例で深める物理』を拝見したとき，教師の側からみれば，ちょっとしたネタ帳とも思える．本書にちりばめられた，そんなネタを幾つか拾い出してみれば「拡散定数とハイゼンベルグの不確定性原理」，「単振動に関する時間平均と分布平均」，「電磁気学におけるモノポール」，「変分原理と経路積分」，「ランダムウォークとエネルギー散逸，カオス」等が見つかる．ご興味をもたれた方は是非本書を手にとって，著者らの工夫をご覧いただきたい．

目次を見れば，本書の構成は第 1 章「物理学の縦糸と横糸」，第 2 章「古典力学と量子力学の対応」，第 3 章「2 項分布からカノニカル分布へ」，第 4 章「2 体問題」，第 5 章「マクスウェルの方程式の微分系と積分系」，第 6 章「磁場と電場の相対性」，第 7 章「フーリエ級数とフーリエ変換」，第 8 章「変分原理」，第 9 章「回転，ユニタリ変換，ローレンツ変換」，第 10 章「1 次元イジング模型と転送行列」，第 11 章「多体系における集団運動と個別運動」，第 12 章「流体力学からカオスへ」，第 13 章「物理現象の次元性」となる．

「縦糸」としての物理数学の各項目を，勉強しながらそこに個別の問題を越えた「横糸」としての普遍性を示そうというのが著者らの意図であろう．物理学は素粒子，原子，固体，天体，宇宙と色々な対象を相手にし，その中から電子計算機を作り，不幸にも軍事物資さえ手がけ，最近では，生命物理，量子計算機などまで夢想する多様性を持つ学問であるが，各論を越えた普遍性（ユニバーサリティー）を何よりも大事にする．そんな物理学の立場を本書においても伝えようというわけである．本書の副題にもある，統一的思考力を身につけるためにという観点から，「拡散方程式」をキーワードにフーリエ変換，経路積分，ランダムウォーク，カオスを議論しながら色々な現象の中を貫く普遍性を議論するわけである．

本書 160 ページのうち以上の 13 章で 80 ページ，14 章は演習問題で 10 ページ強，15 章 40 ページ近くが演習問題の解答で残りの 20 ページが数学公式等のまとめである．全体の半分近くが問題とその解答というわけだが，単に問題の答えを丁寧に示すのではなく，実際に問題を解く過程で，ネタを説明するスタンスであり，教師側も参考になる点も多いであろう．いくつか，そのネタの例を列挙してみれば，古典量子対応，超伝導のマイスナー効果，プラズマ振動，遅延ポテンシャル，特性関数とキュムラント，コッホ曲線とフラクタル等が目にとまる．イジング模型，ポッツ模型と転送行列あたりの議論がやや詳しいのは著者らの専門に近いこともあろう．

以上大学教員からの視点で説明をしてきたが，もちろん真面目に鉛筆をもって自分ですべて計算を追えば，学生諸氏の勉強になることは間違いない．細かい計算もある程度省略せず，書き込んでくれているので，自学自習の書としても十分使えるであろう．大学院入試に十分かどうかは不明ではあるが，個別の分野を完全に理解せずとも，興味を持ちつつ（多分）読み通せる，もしくは拾い読みできるであろうから，表紙に英語で For Senior & Graduate Courses とあるのは気にしないことにして，志ある学部 1，2 年生，あるいは，ちょっと頑張った高校生が，トライしてみるにも良いかもしれない（もちろん，立派な先生が，ネタを仕込む，いやこっそり勉強するのにも役立つとも思われます）．

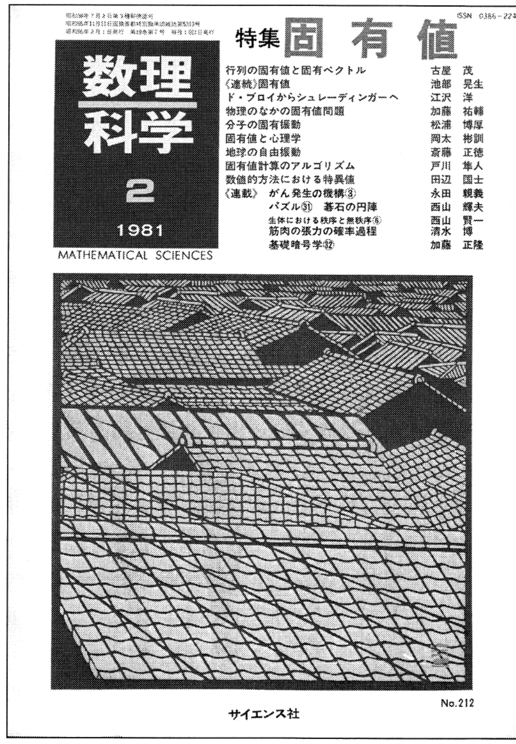
初貝 安弘（筑波大学大学院数理物質科学研究科）

「数理科学」は語る

30年前から現代へのメッセージ

戸川 隼人

1981年2月号



光は波動であり，色は波長に対応する．色は人の心に様々な感情を引き起こすけれども，本質的には連続的なスペクトルの一つの波長に過ぎず，そういう意味では「色即是空」である．

ところが，分光器で輝線スペクトルを眺め，そこにバルマー系列という構造があることを知ると，特定の波長に意味があり，原子構造に起因する根源的なものであることがわかる．この「連続の奥に潜む離散」を解明する鍵が固有値である．

私はそのような話を伯父（阿部望之，東工大，分光化学）から教わった．終戦直後（1946 年頃）のことである．47 年にはポーリングの『一般化学』が出版され，化学は 3 次元的な分子構造を基礎として研究する時代を迎えていた．

しかし，当時はまだ研究者の手元にコンピュータがなく，計算できるのはきわめて単純な問題に限られていた．主な大学に大型計算機が設置され，固有値計算の優れたアルゴリズムが続々と登場し，大規模計算の手法が確立され，実際的な問題が解けるようになったのは 70 年頃からで，固有値の特集の出た 81 年は，まだ急速な発展の途上にあった．

スーパーコンピュータ Cray-1 が登場し，わが国でもスーパーコンピュータが作られて大学の共同利用センターで利用できるようになり，分子研，プラ研などがスタートし，90 年頃からはネットワーク技術が飛躍的な進歩を遂げた．

そのような新しい展開をふまえて，本誌では 06 年 11 月号，特集「固有値問題のひろがり」を出した．

固有値問題の諸相，
WKB 法による固有値問題の解，
ラム・シフトと原子の固有値問題，
埋蔵固有値の摂動論，
周期ポテンシャルの固有値問題，
朝永–Luttinger 模型の固有値問題，
量子化学における固有値問題，
剛性の高い建物の固有値問題・システム同定，

といった内容である．

しかし揺れ動く問題は（広い意味での）固有値問題に関係するから，これにかかわる分野はきわめて広い．思いつくままに並べてみても（順不同），

景気変動，倒産予測，デリバティブ，暗号，
神経回路網，ゲノム解析，データマイニング，
カオス，ソリトン，超弦理論，宇宙論，戸田格子

などをはじめ，本誌の特集テーマの多くが，どこかで固有値を使っている．

数学は，さまざまな研究分野の共通広場，情報交換の場である．固有値は隠れた情報を取り出して問題を解決に導く鍵である．

（とがわ・はやと）

情報幾何の新展開
脳と情報の数理科学

第4回

確率分布族のつくる空間は双対平坦か

指数型分布族は美しい

甘 利　俊 一

今回は，確率分布からなる空間として指数型分布族を取り上げ，幾何学的な概念がどのように役に立つのか，ダイバージェンスを中心に例を述べる．指数型分布族は美しい構造を持っている．

4.1 指数型分布族

4.1.1 指数型分布族の標準形

ここで，確率分布族の典型的な例である指数型分布族を説明しておこう．x を確率変数として，その確率分布（密度関数）が，$\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \cdots, \theta_n)$ をパラメータとして

$$p(x, \boldsymbol{\theta}) = \exp\left\{\sum \theta_i k_i(x) + r(x) - \psi(\boldsymbol{\theta})\right\} \tag{4.1}$$

と書けるものの集まりを指数型分布族と言う[*1]．新しい確率変数 $\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_n)$ を

$$x_i = k_i(x) \tag{4.2}$$

のように導入し，$\boldsymbol{x}$ の測度として

$$d\mu(\boldsymbol{x}) = \exp\{r(x)\}\, dx \tag{4.3}$$

を導入すれば，(4.1) は

$$p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) d\mu(\boldsymbol{x}) = \exp\{\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{x} - \psi(\boldsymbol{\theta})\}\, d\mu(\boldsymbol{x}) \tag{4.4}$$

---

*1) x は離散変数でも実変数でもよい．ベクトルでもかまわないし，無限自由度を持つ軌道のようなものでもよい．

のような標準形に書ける（これからは，$d\mu(\boldsymbol{x})$ を単に $d\boldsymbol{x}$ と書くことが多いが，実は適当の測度に関してという意味である）.

分布を指定するパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ は，分布族のなす多様体の座標と考えてよい．また，規格化定数に対応する関数 $\psi(\boldsymbol{\theta})$ は

$$\psi(\boldsymbol{\theta}) = \log \int \exp(\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{x}) d\mu(\boldsymbol{x}) \tag{4.5}$$

と書ける．指数型分布族は，物理学ではギブス分布に対応するもので，$\psi(\boldsymbol{\theta})$ は自由エネルギーと呼ばれ，大変重要な役割を担う．実は，これから示すように $\psi(\boldsymbol{\theta})$ は凸関数である．だから，この空間に，ダイバージェンスと双対平坦な構造が導入される．

指数型分布族の例をいくつかあげよう．例えば正規分布（ガウス分布とも言う）は，よく知られているように

$$p(x, \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\} \tag{4.6}$$

である．ここでは平均 μ と分散 σ が分布を指定するパラメータであり，ガウス分布の全体はこれらを座標系とする 2 次元の空間をなす．さて，ここで新しい確率変数

$$x_1 = k_1(x) = x, \tag{4.7}$$

$$x_2 = k_2(x) = x^2 \tag{4.8}$$

を導入して，確率変数を形の上で $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)$ の 2 次元にする．x_1 と x_2 は独立でないがかまわない．また，新しいパラメータ（座標系）として

$$\theta_1 = -\frac{1}{2\sigma^2}, \tag{4.9}$$

$$\theta_2 = \frac{\mu^2}{\sigma^2} \tag{4.10}$$

を導入する．こうすれば，確率分布は

$$p(x, \boldsymbol{\theta}) = \exp\left\{\sum \theta_i x_i - \psi(\boldsymbol{\theta})\right\} \tag{4.11}$$

のように指数型分布族の標準形で書ける．規格化定数に対応する $\psi(\boldsymbol{\theta})$ は

$$\psi(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\mu^2}{2\sigma^2} + \log\left(\sqrt{2\pi}\sigma\right) \tag{4.12}$$

$$= -\frac{(\theta)^2}{4\theta_2} - \frac{1}{2}\log(-\theta_2) + \frac{1}{2}\log\pi. \tag{4.13}$$

ただ，x_1 と x_2 とが独立でなく，$x_2 = x_1^2$ を満たすところ以外は確率は 0 である．だから基礎となる $\boldsymbol{x}$ の測度として

$$d\mu(\boldsymbol{x}) = \delta\left(x_2 - x_1^2\right) \tag{4.14}$$

を使わなければならない．

もう一つ，前に挙げた離散変数 $x = 0, 1, \cdots, n$ の上の確率分布で，$p_i =$

$\mathrm{Prob}\,\{x = i\}$ となるもの，

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} p_i \delta_i(x) \tag{4.15}$$

を考えよう．確率分布は $p_0, p_1, \cdots, p_n$ で指定されるが，$\sum p_i = 1$ であるから，座標系としては $\boldsymbol{p} = (p_1, \cdots, p_n)$ を取ってよい．こうした離散確率分布の全体が S_n である．前に述べたように，確率変数

$$x_i = k_i(x) = \delta_i(x), \quad i = 1, \cdots, n \tag{4.16}$$

を導入する．$\delta_0(x)$ は

$$\delta_0(x) = 1 - \sum_{i=1}^{n} \delta_i(x) \tag{4.17}$$

である．また，

$$\theta_i = \log \frac{p_i}{p_0} \tag{4.18}$$

を用いると，これは

$$p(x, \boldsymbol{p}) = \exp\left\{\sum_{i=1}^{n} \theta_i x_i + \log p_0\right\} \tag{4.19}$$

のように指数型分布族になる．関数 ψ は

$$\psi(\boldsymbol{\theta}) = -\log p_0 = \log\left\{1 + \sum_{i=1}^{n} \exp(\theta_i)\right\} \tag{4.20}$$

である．

この他，ガンマ分布，多項分布，ベータ分布，対数指数分布，ポアソン分布，多次元正規分布など，多くのよく知られた分布が指数型分布族に入る．時系列 $\{x(t), t = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots\}$ の分布を考えるならば，例えば AR モデルや MA モデルは指数型分布族である．しかし，指数型分布族に入らないものもある．例えば，時系列の ARMA モデルは指数型分布族ではない．

4.1.2 指数型分布族の部分空間

離散分布 S_n が指数型分布族であるのは良い知らせである．いま，仮に離散変数 x の確率分布の族 $M = \{p(x, \boldsymbol{z})\}$ があって，これが指数型分布族ではないとしよう．$x = 0, 1, \cdots, n$ とする．このとき，$S_n = \{p(x)\}$ を考えれば，これは指数型分布族であるから，モデル M はその部分空間になっている．だから指数型分布族の空間の幾何学を知れば，一般の離散確率分布 M はその部分空間として理解できる．実は，指数型分布族の空間は，これから述べるように双対平坦であり，一般の空間はその中に埋め込まれた曲がった空間と考えればよい．

連続変数 x に関する確率分布の全体 $S = \{p(x)\}$ も，素朴には x 軸を分点

$$-\infty < x_{-N} < x_{-N+1} < \cdots < x_0 < x_1 \cdots < x_N < \infty \tag{4.21}$$

で区分けし，各区間を

$$I_k = (x_{-k}, x_{-k+1}) \tag{4.22}$$

として離散化すれば離散分布が得られる．x が区間 I_k に入る確率を

$$p_k = \int_{I_k} p(x)dx \tag{4.23}$$

とする．区間の数 N を大きくし，p_k がすべて小さくなるようにすれば，$p(x)$ は離散分布 $\boldsymbol{p} = (p_k)$ で近似できる．区間を小さくして区間の確率が 0 に近づく極限を考えれば，S は指数型分布族もしくはその中に埋め込まれた曲部分空間と考えてよさそうである．素朴にはこれでよく，大概の事はうまくいく．しかし，数学的にはこの極限のとり方などに依存する難しい問題をはらんでいる．ここではそれは議論しない（文献 1, 2) などを参照のこと）．

4.1.3 指数型分布族に伴う凸関数

指数型分布族には凸関数 $\psi(\boldsymbol{\theta})$ が伴う*2)．これに対応して Legendre 変換による双対ポテンシャルが存在する．それは

$$\varphi(\boldsymbol{\eta}) = \max_{\boldsymbol{\theta}} \{\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\eta} - \psi(\boldsymbol{\theta})\} \tag{4.24}$$

から計算できる．ここで，前回までの表記ならば $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\theta}^*, \varphi(\boldsymbol{\eta}) = \psi^*(\boldsymbol{\theta}^*)$ と書くべきところである．計算すると，$\varphi(\boldsymbol{\eta})$ は，実はエントロピーの符号を変えたもの，ネゲントロピーと呼ばれる量で，$p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\eta})$ を $\boldsymbol{\eta}$ で指定される確率分布として，

$$\varphi(\boldsymbol{\eta}) = \int p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\eta}) \log p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\eta}) \tag{4.25}$$

である．もちろん，これは双対座標 $\boldsymbol{\eta}$ の凸関数であり

$$\boldsymbol{\theta} = \nabla \varphi(\boldsymbol{\eta}). \tag{4.26}$$

まず，$\psi(\boldsymbol{\theta})$ の勾配 $\nabla \psi(\boldsymbol{\theta})$ を計算する．(4.5) を $\boldsymbol{\theta}$ で微分すれば，

$$\nabla \psi(\boldsymbol{\theta}) = \int \boldsymbol{x} p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{x} = E[\boldsymbol{x}] \tag{4.27}$$

である．つまり，双対座標 $\boldsymbol{\eta} = \nabla \psi(\boldsymbol{\theta})$ は，実は $\boldsymbol{x}$ の平均値である．さらにもう一度微分すると

$$\nabla \nabla \psi(\boldsymbol{\theta}) = E\left[(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\eta})(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\eta})^T\right], \tag{4.28}$$

ヘッシアンは，$\boldsymbol{x}$ の分散行列である．だからこれは正定値で，$\psi(\boldsymbol{\theta})$ は凸関数であることが分かる．

指数型分布族の場合，慣例によってアファイン座標を $\boldsymbol{\theta}$ と書く．これは自然パラメータと呼ばれている．一方，双対アファイン座標系は，これまでのいき

*2) 逆に滑らかな凸関数 $\psi(\boldsymbol{\theta})$ が与えられたとき，これに対応する指数型分布族 $p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})$ が求まるであろうか．(4.5) は Laplace 変換であるから，この問題はその逆問題である．これが文献 3) で議論されている．

さつでは $\boldsymbol{\theta}^*$ と書くべきだが，慣例によってこれを $\boldsymbol{\eta}$ で表す．

$$\boldsymbol{\eta} = \nabla\psi(\boldsymbol{\theta}) = E[\boldsymbol{x}] \tag{4.29}$$

から，これは期待値パラメータと呼ばれる．

$\psi(\boldsymbol{\theta})$ から導かれるダイバージェンスを計算しよう．

$$D\left[\boldsymbol{\theta} : \boldsymbol{\theta}'\right] = \psi\left(\boldsymbol{\theta}'\right) - \psi(\boldsymbol{\theta}) - \boldsymbol{\eta}\cdot\left(\boldsymbol{\theta}' - \boldsymbol{\theta}\right) = \psi(\boldsymbol{\theta}') + \varphi(\boldsymbol{\eta}) - \boldsymbol{\theta}'\cdot\boldsymbol{\eta} \tag{4.30}$$

$$= \int p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})}{p\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}'\right)} d\boldsymbol{x} \tag{4.31}$$

であるから，これは KL ダイバージェンスに他ならない．指数型分布族においては，KL ダイバージェンスは双対平坦性から自然に導かれる．

リーマン計量は

$$g_{ij} = \partial_i \partial_j \psi(\boldsymbol{\theta}) \tag{4.32}$$

であるが（$\partial_i = \partial/\partial\theta_i$ である），これは

$$g_{ij} = E\left[\partial_i \log p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) \partial_j \log p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})\right] \tag{4.33}$$

のように書ける．これは統計学ではフィッシャー情報行列として知られている，統計学の基本的な情報量である*3)．

4.1.4 指数型分布族の拡大

統計学では，確率変数 $\boldsymbol{x}$ が同じ分布から独立に何回も観測される場合を考えることが多い．これを $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ としよう．このとき，全体の確率密度は

$$p\left(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N; \boldsymbol{\theta}\right) = \prod_{i=1}^{N} p\left(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta}\right) \tag{4.34}$$

となる．この多重測定によって幾何学がどう変わるかを見ておこう．指数型分布族を考える．このとき，変数の算術平均

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{x}_i \tag{4.35}$$

を導入すれば，(4.34) は

$$p_N\left(\bar{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{\theta}\right) = p\left(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N; \boldsymbol{\theta}\right) = \exp\left\{N\boldsymbol{\theta}\cdot\bar{\boldsymbol{x}} - N\psi(\boldsymbol{\theta})\right\} \tag{4.36}$$

のように $\bar{\boldsymbol{x}}$ を確率変数とする指数型分布族で書ける．しかし，そのときのポテンシャル関数が N 倍に増え，$N\psi(\boldsymbol{\theta})$ になる．

したがって，ダイバージェンスも N 倍

---

*3)　フィッシャー情報行列をリーマン計量として用いるアイデアは，C.R. Rao が 1945 年にインドで発表したもので，Cramer–Rao の定理もそこで証明されている．この論文がその後の情報幾何発展の源になった．Rao がアメリカで科学研究の最高の栄誉である大統領メダルを受賞したときの功績の一つに，情報幾何の源を作ったことが書かれている．

$$D\left[p_N\left(\bar{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{\theta}\right):p_N\left(\bar{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{\theta}'\right)\right]=ND\left[p(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}):p\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}'\right)\right] \tag{4.37}$$

になり，計量も

$$g_{ij}^N(\boldsymbol{\theta})=Ng_{ij}(\boldsymbol{\theta}) \tag{4.38}$$

のように N 倍に膨れる．だから，$N=1$ の場合だけを考えておいて，N 個の測定がある場合は，ただスケールが N 倍に増えたと考えればよいだけである．面白いことは，この中に入っている曲がった部分空間は，全体が膨らめば，曲った部分は平らに近づく．つまり，曲率は $1/N$ になって，平坦に近づいてくる．

指数型分布族では，推定の Cramer–Rao の不等式が，双対座標 $\boldsymbol{\eta}$ を用いれば等号で達成されるという特徴がある．これを指数型分布族の定義に用いることもできる．

4.2 射影とピタゴラスの定理の応用例

ユークリッド空間においては，ピタゴラスの定理も射影定理もそのまま成立している．指数型分布族は凸関数 $\psi(\boldsymbol{\theta})$ を持つので双対平坦であり，これらの定理が拡張した意味で成立する．ここでは，いくつかの応用例を見よう．

4.2.1 ニューロンの発火確率

2 つのニューロンを取り上げよう．ニューロンはスパイクを確率的に出すとし（これを発火と呼ぶ），確率変数として x_1, x_2 を考え，ニューロン i が発火すれば x_i は 1 の値をとり，発火しなければ 0 であるとする．発火の同時確率を $p\left(x_1,x_2\right)$ と書く．その対数を展開すると，x_i は 0, 1 の 2 値を取るから，

$$\log p\left(x_1,x_2\right)=\theta_1x_1+\theta_2x_2+\theta_{12}x_1x_2-\psi(\boldsymbol{\theta}) \tag{4.39}$$

のように展開できる．すなわち，

$$p\left(x_1,x_2;\boldsymbol{\theta}\right)=\exp\left\{\theta_1x_1+\theta_2x_2+\theta_{12}x_1x_2-\psi(\boldsymbol{\theta})\right\} \tag{4.40}$$

と書けて，これは指数型分布族である．$\boldsymbol{\theta}$ が自然パラメータのアファイン座標系である．双対座標は，

$$\begin{aligned}\eta_i&=E\left[x_i\right]=\mathrm{Prob}\left\{x_i=1\right\},\\ \eta_{12}&=E\left[x_1x_2\right]=\mathrm{Prob}\left\{x_1=1,x_2=1\right\}\end{aligned} \tag{4.41}$$

であるが，η_i は各ニューロンの発火率，η_{12} は 2 つのニューロンの同時発火率を表す．

(4.40) で決まる空間 S の中で，2 つのニューロンの発火が独立であるものは

$$\theta_{12}=0 \tag{4.42}$$

を満たす．独立な分布の全体は S の中の部分多様体をなすが，上式から分かるようにこれは平坦な部分空間である（図 4.1）．これを I と書こう．

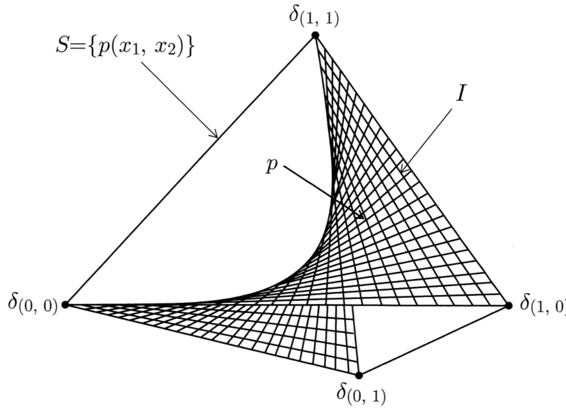


図 4.1　2 つのニューロンの発火確率分布空間 S と独立分布の作る部分空間 I.

$$I=\{p(x_1,x_2)\mid p(x_1,x_2)=p(x_1)\,p(x_2)\} \tag{4.43}$$

独立でない分布 $p(x_1,x_2)$ が与えられたときに，これを I に属する独立分布で近似したい．このとき，$p(x_1,x_2)$ から I へのダイバージェンスを最小にする

$$\min_{q\in I} D[p(x_1,x_2):q(x_1,x_2)] \tag{4.44}$$

を求めれば，これは $p(x_1,x_2)$ を I に双対射影すればよい．答えは，$p(x_1)$, $p(x_2)$ を $p(x_1,x_2)$ の周辺確率分布として

$$q(x_1,x_2)=p(x_1)\,p(x_2) \tag{4.45}$$

で，これは $p(x_1,x_2)$ と同じ発火率を持つ 2 つのニューロンが独立に発火する場合である．

いま，分布

$$p_0(x_1,x_2)=\frac{1}{4} \tag{4.46}$$

を考えると，これは一様分布でエントロピーが最大である．分布 $p(x_1,x_2)$ から $p_0(x_1,x_2)$ へのダイバージェンスは

$$D[p:p_0]=\sum p(x_1,x_2)\log\frac{p(x_1,x_2)}{p_0(x_1,x_2)}=-H+\log 4 \tag{4.47}$$

で，これはエントロピーで書ける．エントロピーは，定数 $\log 4$ を除けば，p の一様分布へのダイバージェンスを負にしたものとも言える．

ピタゴラスの定理によれば，

$$D[p:p_0]=D[p:q]+D[q:p_0] \tag{4.48}$$

が成立する．すなわち，p が一様分布とどのくらい離れているかは，p が独立分布とどのくらい違うかを示すダイバージェンス $D[p:q]$ と，独立分布 q が一様分布とどのくらい離れているかを示す $D[q:p_0]$ との和に分解できる（図 4.2）．前者は 2 つのニューロンの相関の影響であり，後者は発火率に由来する．つま

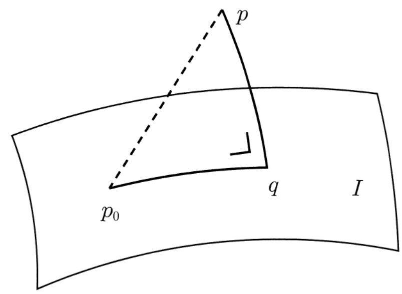


図 4.2　ダイバージェンスの分解.

り，ニューロン間の発火率の変動の影響と，相関の影響を分解できる．I が平坦であるから，双対射影は一意的に決まり，この分解は直交分解である．

4.2.2 エントロピー最大原理

一定の条件を満たす確率分布の候補が多数あるときは，その中でエントロピーが最大のものを選ぼうという指針がある．これがエントロピー最大原理である．これは，情報幾何の立場からは，ピタゴラスの定理に帰着できる．

いま，$\boldsymbol{x}$ を確率変数とし，その関数 $f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_m(\boldsymbol{x})$ が与えられたとしよう．物理学では，$\boldsymbol{x}$ は系の状態，$f(\boldsymbol{x})$ は例えば，状態 $\boldsymbol{x}$ の系のエネルギーや運動量などである．これらの量の期待値が一定値に決まっているとしよう．

$$\int p(\boldsymbol{x}) f_i(\boldsymbol{x}) = c_i, \quad i = 1, \cdots, m. \tag{4.49}$$

この条件を満たす確率分布 $p(\boldsymbol{x}, c_1, \cdots, c_m)$ の全体を $M(\boldsymbol{c})$ と書こう．$M(\boldsymbol{c})$ に属する分布でエントロピーが最大になるものを求めたい．

通常はラグランジュの未定係数法を用い，汎関数

$$F[p] = -\int p(\boldsymbol{x}) \log p(\boldsymbol{x}) dx + \sum \theta_i \int p(\boldsymbol{x}) f_i(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} + \lambda_0 \int p(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} \tag{4.50}$$

を最大にする分布を求める．変分を取れば

$$\delta F = -\int \left[\log p(\boldsymbol{x}) + \sum \theta_i f_i(\boldsymbol{x}) + c \right] \delta p(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} = 0. \tag{4.51}$$

したがって答えは指数型分布族 $E = \{p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})\}$,

$$p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) = \exp\left\{ \sum \theta_i f_i(\boldsymbol{x}) - \psi(\boldsymbol{\theta}) \right\} \tag{4.52}$$

となる．$\boldsymbol{\theta}$ は $\boldsymbol{c}$ の値から定まるから，期待値 $\boldsymbol{c}$ の値に応じて分布が一つ定まる．この分布族は，m 次元の平坦な部分空間 E をなす．

ところで，条件 (4.49) を満たす分布は，もし確率分布 $p(\boldsymbol{x})$ 全体の空間の次元が n ならば，$n - m$ 次元の部分空間 $M(\boldsymbol{c})$ であり（全体が関数空間ならば補次元が m の部分空間)，これは双対平坦空間である．確率分布 p のエントロピーは，

$$H[p] = \text{const} - D\left[p : p_0\right] \tag{4.53}$$

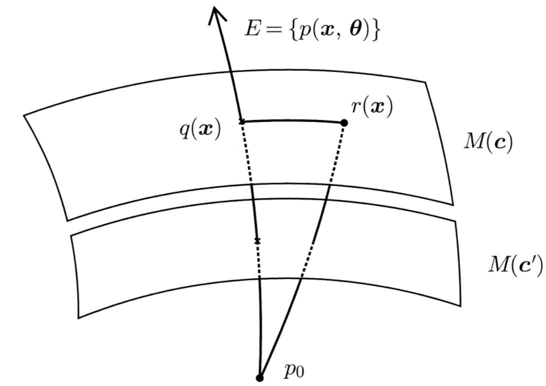


図 4.3　エントロピー最大原理と指数型分布族.

である．だから，エントロピー最大は，M に属する $D[p : p_0]$ が最小となる確率分布を求める問題である．

答えは明らかに p を M に射影したものである．M の勝手な $r(\boldsymbol{x})$ を取れば，ここから p_0 へのダイバージェンスは，

$$D[r : p_0] = D[r : q] + D[q : p_0] \geq D[q : p_0] \tag{4.54}$$

となる（図 4.3）．だから射影 $q(\boldsymbol{x}) \in E$ がエントロピー最大の分布である．束縛 $\boldsymbol{c}$ をいろいろ変えれば，答えは (4.52) となり，答えの全体は $M(\boldsymbol{c})$ に直交する指数型分布族 (4.52) になる．いいかえれば，指数型分布族は，すべての $M(\boldsymbol{c})$ に直交する平坦な空間である．

終わりの一言

今回は指数型分布族を用いて，これが双対平坦なリーマン空間を作ること，さらに応用として，いろいろな量の分解やエントロピー最大原理などが，実は平坦性から出る性質であることを導いた．平坦性の応用は数多く，この他にもいろいろと出てきて，情報幾何の諸分野への応用として重要である．次回は，不変性に着目して，確率分布のダイバージェンスがここからどのように定まるか，不変なダイバージェンスを調べよう．

参考文献

1) A. Cena and G. Pistone, Exponential statistical manifold, *Ann. Inst. Ststis. Math*, **59**, 27–56, 2007.
2) M.R. Grasselli, Dual connections in nonparametric classical information geometry, *Ann. Inst. Stat. Math.*, **62**, 873–896, 2010.
3) A. Banerjee, S. Merugu, I. Dhillon and J. Ghosh, Clustering with Bregman Divergences, Journal of Machine Learning Research, 6, 1705–1749, 2005.

（あまり・しゅんいち，理化学研究所脳科学総合研究センター）

リレー連載
現象から方程式を創り出す
第13回 ―立式で鍛える論理的思考法―

ギンツブルク・ランダウ方程式と超伝導現象

森田　善久

1. 超伝導現象

近年の観測技術の進歩は目覚ましい．電子顕微鏡によるミクロな世界の原子や分子の観測技術から始まって宇宙のスケールでは何十億光年も離れた銀河系の星雲の様子が観測され送られてくる．これらの技術は，ナノテク技術の進歩や，データを解析し映像化する技術の発展に支えられている．

古典力学と量子力学の間の距離の大きな理由の一つは，我々が体感できる世界と量子の世界のスケールがオーダー的に違っていることにあり，量子的な効果はなかなか通常の観測技術で以前は見ることができなかった．超伝導現象の面白さは，抵抗零のような現象やマイスナー効果と呼ばれる磁場をシールドする現象など，極低温ではあるが，現実の目に見えるスケールで確認でき，素人感覚にも強く訴え想像力を刺激するような現象であるからではないかと推測される．量子力学の理論は古典力学の世界の常識で判断すると奇妙な法則がたくさん存在する不思議な世界であるが，超伝導の場合には，その量子効果が実験室で確認できる現象としての面白さがある*1)．

ここでは，超伝導の典型的なマクロな現象である**永久電流**と**マイスナー効果**，そして**磁場による超伝導と常伝導間の転移**について**ギンツブルク・ランダウ方程式**（以下ではしばしば**GL 方程式**と呼ぶ）という数理モデルにより，どのように表現され理解されるかを数学的な観点から入門的解説を試みる．GL 方程式はいわゆる現象論的なモデル方程式で，超伝導のミクロなレベルで起こっている量子的な現象を完全に理解しなくても，数式をうまく扱えば，これらのマクロな現象がモデルでうまく表現できることを理解できる．このようなアプローチは，複雑な現象を理解するときに，細部にこだわらずその骨格部分を見据え，現象の本質的な法則や構造を理解するのに有効である．**GL 理論**はこのようなアプローチの最も成功した例の一つといえる．

現実のモデル化の際には，現象の深い物理的背景の理解が必要であるが，この小論では物理法則の理解より，あくまでモデル化によって特徴的な現象がうまく表現できているかについて重点をおいた解説を試みる．物理サイドから超伝導に関する多数の解説記事や解説書が出ているが，少し違った視点と色合いを与えたい．

---

*1) 超伝導現象においても，ミクロに起こってることを観測できる技術が発展している．外村彰氏の著書『目で見る美しい量子力学』（サイエンス社）では電子顕微鏡を使った量子化された磁場の観測などが取り上げられており大変興味深い．

2. 自由エネルギー，秩序変数，磁場とゲージ変換等

次節以降の準備としていくつかの用語や基本的な関係式，概念を紹介しておく．

《エネルギーについて》

ニュートン力学における運動法則とエネルギーの概念は密接に関係している．「質量 × 加速度 = 力」の原理からエネルギーに関する法則が導かれる．例えば質量 m の質点で x を平衡状態からの変位とし，働く力 F が単振動や単振り子のように x の関数で表されるとき，その運動方程式は

$$m\ddot{x} = F(x) \quad (\ddot{x} = d^2x/dt^2)$$

である．この両辺に $\dot{x}$ を乗じて積分すれば

$$\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x) = C, \quad V(x) = -\int F(x)dx$$

というエネルギー保存の式が得られる．現実の世界では抵抗等のため系のエネルギーは熱に変わりエネルギーが減衰する．そこで熱によるエネルギーの散逸も考えた熱力学的平衡状態を理解するには，エネルギーだけでなくエントロピーも考慮しなければならない．系の内部エネルギーを U，エントロピーを S，温度を T とすると等温等圧の条件で考えられるヘルムホルツの**自由エネルギー**は $F = U - TS$ で与えられる*2)．熱的平衡状態はこのエネルギーを最小にする状態である．この自由エネルギーの考え方は，平衡系のみならず非平衡系においても現象論的記述でよく威力を発揮する．

《相転移と秩序変数》

温度変化等によって起こる物質の**相転移**を記述するには，新たに出現する秩序相を表現する**秩序変数**を導入すると便利である．例としては，常磁性の状態では無秩序だった磁気モーメントの向きが，ある一定温度以下になったときに向きが揃う強磁性状態に転移する現象がある．これを表現するのに磁気モーメント平均値を秩序変数にとると，磁気の向きの整列度合いをマクロに表現することができる．また，他の例として臨界温度近くでの水と氷の 2 相が混ざった状態において，水（あるいは氷）の密度を秩序変数にとることによって，液相（あるいは固体相）の状態を表現することができる．

ランダウ理論では，相転移による新しい秩序状態はこの秩序変数に関する自由エネルギーでもって記述される[2)]．系の状態はエネルギーを最小化（あるいは極小化）する秩序変数で表現される．後で見るように，超伝導現象も相転移の一種でうまい秩序変数と自由エネルギーを導入することによって GL 方程式が導かれる．

《静磁場のマクスウェル方程式》

超伝導現象を理解するためには磁場が与える効果を無視できない．後の説明では時間に依存しない静磁場の場合だけが必要になるのでこの場合だけ紹介しておく．$\boldsymbol{B}$ を磁場（磁束密度），$\boldsymbol{J}$ を電流密度，c を光速とすると cgs（ガウス）単位系の場合*3) の静磁場の状態を表すマクスウェル方程式は

$$\mathrm{rot}\boldsymbol{B} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{J}, \quad \mathrm{div}\boldsymbol{B} = 0$$

である．また，このときの**磁場のエネルギー密度**は $|\boldsymbol{B}|^2/8\pi$ で与えられる．

《ベクトルポテンシャルとゲージ不変性》

磁場 $\boldsymbol{B}$ に対してその磁場のポテンシャル（ベクトルポテンシャル），すなわち $\mathrm{rot}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$ となる $\boldsymbol{A}$ を導入することができる．特に，量子力学ではこのベクトルポテンシャルは本質的な役割をする．ベクトルポテンシャルで表現された系では**ゲージ変換** $\boldsymbol{A} \mapsto \boldsymbol{A} + \nabla\chi$ に関して不変である．ここで χ は任意の滑らかなスカラー関数である*4)．この任意性に依存しない量が物理的に意味をもつ観測量となる．

《波動関数とシュレディンガー方程式》

量子力学では 1 粒子系の運動方程式に対応する方程式がシュレディンガー方程式になる．粒子にともなう物質波の状態は複素数値の**波動関数** $\psi(x,t)$ で表され，この時間発展を記述する方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(x)\psi$$

*2) 外部からのエネルギーも含めた総エネルギーを表すエンタルピーを H とすると，等温等積条件でのギブスの自由エネルギーは $G = H - TS$ である．F と G の間は $H = U + PV$（P：圧力，V：体積）でつながる[1)]．

*3) 現在は mksa 単位系が主流であるが，記述の簡単化のためこちらを採用する．

*4) $\mathrm{rotdiv}\chi = 0$ に注意．

と与えられる．ここで $\hbar$ はプランク定数 h を 2π でわったもので，m は粒子の質量，$V(x)$ はポテンシャルを表す実関数である．また，このときのエネルギー密度は $(\hbar^2/2m)|\nabla\psi|^2+V(x)|\psi|^2$ である．

3. GL エネルギー

ここでギンツブルクとランダウによって提案されたエネルギー関数を与えよう．超伝導現象との対応は次節以降見ていく．

超伝導状態を特徴づける秩序変数を Ψ とする．この秩序変数は超伝導電子の波動関数として考えるため複素変数である．その絶対値の2乗 $|\Psi|^2$ は超伝導電子の密度に対応する．$\boldsymbol{A}$ を磁場のベクトルポテンシャルで磁束密度を $\boldsymbol{B}=\mathrm{rot}\boldsymbol{A}$ とすると，超伝導体におけるエネルギー密度 f_{sB} は

$$f_{sB}=f_{s0}+\frac{\hbar^2}{2m_s}|D_A\Psi|^2+\frac{|\boldsymbol{B}|^2}{8\pi} \qquad (1)$$

で与えられる．ここで f_{s0} は

$$f_{s0}=f_{n0}+\alpha|\Psi|^2+\frac{\beta}{2}|\Psi|^4$$

で，f_{n0} は常伝導状態のエネルギー密度である．また，m_s は超伝導電子の質量で，$D_A:=\nabla-(ie_s/\hbar c)\boldsymbol{A}$ である．ただし，e_s は超伝導電子がもつ電荷を表す．

このエネルギー密度関数を超伝導体に対応する領域 Ω で積分して得られる汎関数の**変分方程式**（**オイラー・ラグランジュ方程式**）が超伝導理論における GL 方程式である．

GL 方程式の導出は後回しにして，このモデルがどのようにして超伝導現象を表現しているのかについて次節以降，少しずつ解き明かしていく．

4. 超伝導における相転移と秩序変数について

この節ではエネルギー密度 f_{sB} の式に現れる f_{s0} の部分を導く．

超伝導現象は，アルミや水銀，ニオブなどの伝導体を絶対温度近くまで下げたときに抵抗が零になる現象として最初に発見された．これはある臨界温度を境に導体の性質が特徴的に変化する相転移現象の一種である．電流の伝導性は自由電子の動きに因るから，臨界点を境に常伝導状態の電子より，超伝導状態の電子の自由エネルギーがより低くなると考えられる．超伝導現象では，本来フェルミ粒子であった電子がクーパーペアと呼ばれる対を成し，ボース粒子として振る舞う．この超伝導電子対の集団は一つの波動関数で記述できる*5)．これが超伝導の相転移における秩序変数となる．この秩序変数を Ψ としその絶対値の2乗を超伝導電子の密度に規格化する．すなわち，単位体積当りの超伝導電子の個数を n_s とすると，秩序変数 Ψ は $\Psi=\sqrt{n_s}e^{i\varphi}$ $(n_s=|\Psi|^2)$ と表される．

相転移の理論（ランダウ理論）によると，相転移の起こる臨界点の近くでは自由エネルギーはこの秩序変数の関数で，その関数は秩序変数で展開できると仮定される．今の場合，秩序変数は複素なので Ψ とその複素共役 $\overline{\Psi}$ を変数とする実数値のエネルギー密度関数 $E=E(\Psi,\overline{\Psi})$ を仮定しよう．波動関数の位相によってエネルギーは変わらないとしてよいので，Ψ と $\overline{\Psi}$ で展開した場合，$|\Psi|^2$ の項しか現れないはずである．すなわちエネルギー密度の関数 $E(\Psi,\overline{\Psi})$ は，任意の実数 θ に対して

$$E(\Psi e^{i\theta},\overline{\Psi e^{i\theta}})=E(\Psi,\overline{\Psi})$$

より，その展開は

$$E=E(0,0)+\alpha|\Psi|^2+\frac{\beta}{2}|\Psi|^4+\cdots$$

となる．ここでの係数は実である．臨界点の近くでは $|\Psi|$ が大きくないと仮定すると高次の項を無視して，$E(0,0)=f_{n0}$ とおけば前節のエネルギー密度関数の f_{s0} の部分が得られる．

この関数 f_{s0} の係数 α, β の符号を決定しよう．**臨界温度** T_c の前後での f_{s0} の最小値は変わるので係数は温度の関数 $\alpha=\alpha(T)$, $\beta=\beta(T)$ である．すなわち，$T>T_c$ なら f_{s0} は $|\Psi|^2=0$（常伝導状態）で最小値 f_{n0} をとり，$T<T_c$ では $|\Psi|^2$ が正の値のとき（超伝導状態）で最小値をとらなければならない．これから $\beta(T)>0$ で，

*5) ボース・アインシュタイン凝縮（BEC）と呼ばれる現象では，粒子の集団が最低エネルギーの1粒子状態をとる．ルビジウムやナトリウムの気体原子を冷却すると起こる．超伝導やヘリウム4の超流動体でもこのような凝縮が起きている．

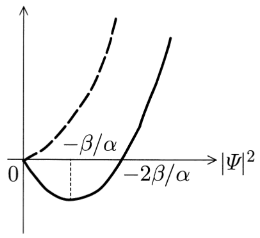


図 1　エネルギー密度関数 $f_{s0} - f_{sn}$ のグラフを表す．横軸は $|\Psi|^2$ で実線は $\alpha < 0$，破線は $\alpha > 0$ の場合を表す．

$\alpha(T) > 0$ $(T > T_c)$，$\alpha(T) < 0$ $(T < T_c)$ である（図 1 参照）．

以下では温度は $T < T_c$ で固定して考えるので T 依存性は明記しない．$\Psi = \sqrt{-\alpha/\beta}\psi$ とスケーリングすると

$$f_{s0} - f_{sn} = \frac{\alpha^2}{\beta}\left(-|\psi|^2 + \frac{1}{2}|\psi|^4\right) \qquad (2)$$

と右辺は無次元化される．

5. 永久電流と GL 方程式

歴史的に最初に発見された超伝導の特徴的な現象として，超伝導体を電流が抵抗なしで流れることが知られている．臨界温度以下におかれた超伝導試料でできたループ状の細線中を，電流が減衰せずに流れ続けることが実験で確かめられている（図 2 参照）．

この現象をモデル化するためには，空間的な変化を考える必要がある．ただし，外部磁場は考えなくてよい．また，電流が流れることによって発生する磁場は，導体が十分細ければその効果は小さく，自身にフィードバックする影響は近似的に無視できるとしてよい．空間的依存性を考慮するため臨界点近くでの自由エネルギーが Ψ の微分にも依存すると考えるが，空間的な変動自体は小さいとし，1 階偏導関数のみに依存すると仮定する．また，空間に関する回転でエネルギーは変わらないことを仮定すれば，微分演算が回転によって不変性を保つように $\nabla\Psi, \nabla\overline{\Psi}$ で展開できるとしてよい．最後に前節でも触れたように $\Psi \mapsto \Psi e^{i\theta}$ $(\theta \in \mathbb{R}^1)$ に関する不変性を考慮すると，$|\nabla\Psi|^2$ の項が得られる．こうしてエネルギー密度関数として前節の自由エネルギーの項にこの微分の項を加えた

$$\frac{\hbar^2}{2m_s}|\nabla\Psi|^2 + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4 \qquad (3)$$

が得られる．第一項は磁場の効果を無視した超伝導電子の空間分布から寄与するエネルギー密度に相当し，その係数は 1 粒子系の波動方程式と同じような決め方になっている．(3) は (1) において $\boldsymbol{A} \equiv 0$ とした場合に相当することに注意しておこう．

(3) を用いて永久電流に対応する現象を考察する．ループ上の細線の超伝導体として最も単純な 1 次元の円を考えれば，$\psi = \sqrt{-\beta/\alpha}\Psi$ とスケーリングしエネルギーを規格化した形

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_0^L \left\{\frac{\xi^2}{2}|\psi_x|^2 + \frac{1}{4}(1 - |\psi|^2)^2\right\} dx$$

を考えればよい．ここで $\xi = \sqrt{-\hbar^2/2m_s\alpha}$ で[*6)]，ψ は周期 L の周期関数である．

このエネルギー汎関数の**停留点**を与える変分方程式を求めよう．任意の滑らかな周期関数 $\eta(x)$ に対して

$$\frac{d}{ds}\mathcal{E}(\psi + s\eta)_{|s=0} = 0$$

となる条件がこのエネルギーの停留点を与える．実際に計算すると

$$\begin{aligned}&\frac{d}{ds}\mathcal{E}(\psi + s\eta)_{|s=0}\\ &= \mathrm{Re}\int_0^L \xi^2\psi_x\overline{\eta_x} + (1 - |\psi|^2)\psi\overline{\eta}dx\\ &= \mathrm{Re}\left[\xi^2\psi_x\overline{\eta}\right]_0^L\\ &\quad - \mathrm{Re}\int_0^L \left(\xi^2\psi_{xx} + (1 - |\psi|^2)\psi\right)\overline{\eta}dx.\end{aligned}$$

よって任意の $\eta(x)$ に対してこの式が零になる条件として ψ の方程式

$$\xi^2\psi_{xx} + (1 - |\psi|^2)\psi = 0 \qquad (4)$$

が得られる．これがエネルギー関数 $\mathcal{E}$ のオイラー・

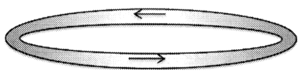


図 2　リング状の超伝導体と永久電流．矢印は電流の向きを表す．

*6)　この ξ はコヒーレンス長と呼ばれる物理的に意味のある重要なパラメータである．

ラグランジュ方程式で最も単純な設定の場合のGL方程式である．

k を任意の整数とし，$2|k|\pi\xi/L<1$ のとき，この方程式に

$$\psi=a_k\exp(2k\pi ix/L),\quad a_k:=\sqrt{1-4k^2\pi^2\xi^2/L^2}$$

を代入するとこれは解になっていることがすぐ確かめられる．$k=0$ の場合の解は $\mathcal{E}$ を零とするエネルギーを最小化する解で空間的に一様な超伝導状態を表している．

量子力学の電流密度の表し方から波動関数 $\Psi=|\Psi|e^{i\varphi}$ に対して

$$\boldsymbol{J}=\frac{\hbar e_s}{2m_s i}(\overline{\Psi}\nabla\Psi-\Psi\nabla\overline{\Psi})=\frac{\hbar e_s n_s}{m_s}\nabla\varphi$$

である．ここで $n_s=|\Psi|^2=-\alpha/\beta$．よって，$|k|\geq 1$ の場合の解は $J\neq 0$ で，超伝導電流が存在することを表す．このときのエネルギーは $|k|$ の値とともに増大する．数学的にはこの解がエネルギーの極小値を与えていることを示す必要があるが，$\mathcal{E}$ に解を代入し $L\to\infty$ とするとその値は零に近づくので，十分大きな L に対しては**安定**であることが期待できる．こうして (4) は永久電流に対応する現象を表現する最も単純なモデル方程式になっている．なお，一般の位相的に複雑な領域において永久電流に相当する安定な解を数学的に構成する問題は文献3) を参照するとよい．

6. マイスナー効果と磁場による相転移

永久電流は抵抗が零になる**完全伝導性**という性質からきているが，マイスナー効果と呼ばれる超伝導のもつさらに本質的に重要な特徴である**完全反磁性**について述べる．超伝導状態にある試料にそれほど強くない磁場をかけると超伝導体は磁場の侵入を拒む (図3参照)．また，常伝導状態で磁場をかけた状態から臨界温度以下にして超伝導状態に転移すると，磁場は超伝導体から押し出される*7)．

この現象において侵入した磁場を圧し出すため

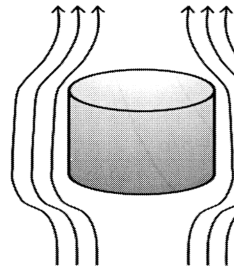


図3 マイスナー効果によって磁場が超伝導体内に侵入できない様子を表している．

にはエネルギーが必要である．すなわち系がもつ自由エネルギーは，磁場が侵入した状態のほうが高く，磁場が内部に存在しない低い状態のほうに遷移したと想像できる．さらに磁場を強くしていくと遂には超伝導状態を維持できなくなり，常伝導状態に戻る．一方，臨界温度以下で強い磁場下の常伝導状態にある導体において磁場を下げていくとある磁場の強さを境に超伝導状態に変化する．これから磁場の強さを変えることによる相転移現象が起こっていると考えることができる．

以上の現象を前節のエネルギー密度関数 (3) を修正したモデルで理解してみよう．まず，磁場の効果を考えるため，Ψ が電荷をもつ電子対の波動関数であること，ゲージ変換に対して不変であることの要請より，エネルギー密度関数 (3) の最初の項を

$$\frac{\hbar^2}{2m_s}|D_A\Psi|^2=\frac{\hbar^2}{2m_s}\left|\nabla\Psi-i\frac{e_s}{\hbar c}\boldsymbol{A}\Psi\right|^2$$

に修正し，さらに磁場のエネルギー密度 $|\boldsymbol{B}|^2/8\pi$ を加える必要がある．これによってゲージ変換 $(\Psi,\boldsymbol{A})\mapsto(\Psi e^{i(e_s/\hbar c)\chi},\boldsymbol{A}+\nabla\chi)$ に対して確かに不変であることはすぐ確かめられる*8)．こうして (1) が得られる．

外部磁場 $\boldsymbol{H}_a$ を印加する場合にはエネルギー密度関数に外部磁場からの寄与を加える必要があり，(1) における $|\boldsymbol{B}|^2$ を $|\boldsymbol{B}-\boldsymbol{H}_a|^2$ に変更する．ψ でスケーリングした形に書くと

$$f_{sB}-f_{n0}=\frac{\alpha^2}{\beta}\left[\frac{1}{2}|\psi|^4-|\psi|^2+\xi^2|D_A\psi|^2+\frac{\beta}{8\pi\alpha^2}|\boldsymbol{B}-\boldsymbol{H}_a|^2\right]$$

*7) 実際には，磁場は超伝導体の表面からごく薄い部分に侵入し，この表面上で超伝導体を磁場からシールドするように反磁性電流が流れる．

*8) この D_A は共変微分と呼ばれる．

となる[*9)]．さてこのエネルギー密度を導体内 Ω で積分し α^2/β で割る．ただし，磁場については空間全体で積分をとると $\boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\boldsymbol{A}$ であったから

$$\mathcal{E}_H(\psi, \boldsymbol{A}) := \int_\Omega \left[\frac{1}{2}|\psi|^4 - |\psi|^2 + \xi^2|D_A\psi|^2\right] + \frac{\beta}{8\pi\alpha^2}\int_{\mathbb{R}^3}|\mathrm{rot}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{H}_a|^2 dx$$

を得る．

このエネルギー関数を使って，マイスナー状態のエネルギーと常伝導状態のエネルギーを比べる．まず，$\boldsymbol{A}_a$ を $\mathrm{rot}\boldsymbol{A}_a = \boldsymbol{H}_a$ を満たすようにとる．常伝導状態に対応するのは $(\psi, \boldsymbol{A}) = (0, \boldsymbol{A}_a)$ だから，このときのエネルギーは $\mathcal{E}_H(0, \boldsymbol{A}_a) = 0$ となる．一方，超伝導体内に磁場が侵入できないマイスナー状態に対応するものとして

$$\psi = 1, \quad \boldsymbol{A}_0 := \begin{cases} 0 & (x \in \Omega) \\ \boldsymbol{A}_a & (x \notin \Omega) \end{cases}$$

を考える．この関数は不連続だが，近似として採用する．これをエネルギーの式に代入すると

$$\mathcal{E}_H(1, \boldsymbol{A}_0) = |\Omega|\left(-\frac{1}{2} + \frac{\beta}{8\pi\alpha^2}|\boldsymbol{H}_a|^2\right)$$

である（$|\Omega|$ は Ω の体積）．2 つのエネルギー量を比較して

$$\mathcal{E}_H(0, \boldsymbol{A}_a) = \mathcal{E}_H(1, \boldsymbol{A}_0)$$

となるのは，$|\boldsymbol{H}_a| = H_c := (4\pi\alpha^2/\beta)^{1/2}$ のときで

$$\mathcal{E}_H(0, \boldsymbol{A}_a) < \mathcal{E}_H(1, \boldsymbol{A}_0) \quad (|\boldsymbol{H}_a| > H_c),$$
$$\mathcal{E}_H(0, \boldsymbol{A}_a) > \mathcal{E}_H(1, \boldsymbol{A}_0) \quad (|\boldsymbol{H}_a| < H_c)$$

が成り立つ．すなわち H_c を境にエネルギーの大小が逆転する．

図 4 は臨界温度 T_c と**臨界磁場** H_c の関係を $H_a - T$ 平面 $(H_a = |\boldsymbol{H}_a|)$ に図示したものである．係数 α は温度 T の関数で，よって H_c もそうであり図中の曲線はそのグラフを表す．曲線の内側では超伝導状態，外側は常伝導状態が実現される．

なお上の考察を数学的に正確な議論にするためには，不連続な関数による近似でなく，エネルギー関数の停留点を与える関数が必要である．実際には，常伝導状態から転移が起こることだけを証明するのであれば，常伝導状態の解がエネルギーの最小値をとる臨界値を数学的に定式化すればよい．

*9) ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ を $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_a + \boldsymbol{A}_{in}$ $(\mathrm{rot}\boldsymbol{A}_a = \boldsymbol{H}_a)$ と分解する．このとき $|\boldsymbol{B} - \boldsymbol{H}_a|^2 = |\mathrm{rot}\boldsymbol{A}_{in}|^2$ となり，この項は超伝導体内の磁場に対応するエネルギーとみなすことができる．

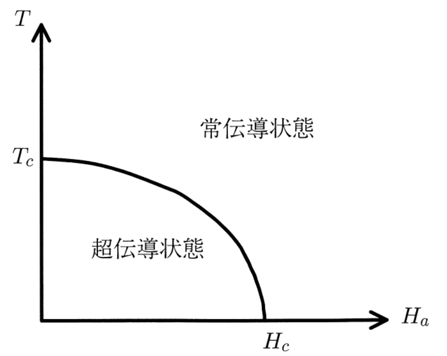


図 4　臨界磁場 H_c と臨界温度 T_c の関係を表す．横軸は外部磁場の強さ，縦軸は温度である．

7. 変分方程式としての GL 方程式

さていよいよエネルギー関数 $\mathcal{E}_H$ の変分を計算して磁場のある場合の GL 方程式を導こう．$D_A = \nabla - iq\boldsymbol{A}$ $(q = e_s/\hbar c)$ とおく．

$$\frac{1}{2}\frac{d}{ds}\int_\Omega |D_{A+sA_1}(\psi + s\psi_1)|^2 dx_{|s=0}$$
$$= \mathrm{Re}\int_\Omega (D_A\psi \cdot \overline{D_A\psi_1} + D_A\psi(iq\boldsymbol{A}_1\overline{\psi}))dx.$$

ガウス・グリーンの公式を使い，整理すると

$$= \mathrm{Re}\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{\nu} \cdot D_A\psi)\overline{\psi_1}dS - \int_\Omega (D_A^2\psi)\overline{\psi_1}dx$$
$$- \mathrm{Im}\int_\Omega q\overline{\psi}D_A\psi \cdot \boldsymbol{A}_1 dx.$$

$\boldsymbol{\nu}$ は領域 Ω の境界 $\partial\Omega$ の法線方向の単位ベクトルである．一方，磁場のエネルギーの変分は

$$\frac{1}{2}\frac{d}{ds}\int_{\mathbb{R}^3}(|\mathrm{rot}(\boldsymbol{A} + s\boldsymbol{A}_1)|^2 - 2\mathrm{rot}(\boldsymbol{A} + s\boldsymbol{A}_1) \cdot \boldsymbol{H}_a)dx_{|s=0}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^3}(\mathrm{rot}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{H}_a) \cdot \mathrm{rot}\boldsymbol{A}_1 dx$$
$$= \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{rot}^2\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{A}_1 dx.$$

ただし，$\mathrm{rot}\boldsymbol{H}_a = 0$ で $\mathrm{rot}\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{H}_a$ $(|x| \to \infty)$ を使った．

結局任意の試験関数 $(\psi_1, \boldsymbol{A}_1)$ に対して変分が零になる条件として次のオイラー・ラグランジュ方

程式

$$\xi^2 D_A^2\psi + (1-|\psi|^2)\psi = 0 \quad (x\in\Omega),$$
$$\nu\cdot D_A\psi = 0 \quad (x\in\partial\Omega),$$
$$\frac{\lambda^2 e_s}{\hbar c}\mathrm{rot}^2\boldsymbol{A} - \mathrm{Im}(\overline{\psi}D_A\psi)1_\Omega = 0 \quad (x\in\mathbb{R}^3),$$
$$\mathrm{rot}\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{H}_a \quad (|x|\to\infty)$$

を得る．ここで $\lambda = (\beta/8\pi\alpha^2 q^2\xi^2)^{1/2}$ とおいた．また 1_Ω は $1_\Omega(x) = 1\ (x\in\Omega),\ 1_\Omega = 0\ (x\notin\Omega)$ という集合 Ω に対する特性関数である．この ψ と $\boldsymbol{A}$ に関する方程式が，与えられた領域 Ω における磁場の効果がある場合のギンツブルク・ランダウ方程式である（磁場のない場合の ψ に関する方程式も同様に GL 方程式と呼ぶ場合が多い）．この方程式の安定な解が物理的に実現される現象に対応する解として期待される．なお，上の λ はロンドンの侵入長と呼ばれるマイスナー状態のときにどれくらい磁場が表面から侵入できるかを決める物理的に意味のある量である．

8. 補足

すでに述べたが，超伝導体は強い磁場に対しては磁場の侵入を防ぐことができなくなり，超伝導状態を維持できなくなる．このとき，単純に常伝導状態に戻る場合と，磁場の侵入を一部許して超伝導と常伝導が共存する場合の2通りがある．前者を**第一種超伝導体**と呼び，後者を**第二種超伝導体**と呼ぶ*10)．第二種超伝導体では磁場が正常状態と超伝導状態の間に混合状態と呼ばれる磁場が量子化された**渦糸**構造が現れる．この磁場の量子化現象は理論的にも応用的にも大変興味ある対象である．この渦糸に対応する GL 方程式の解の数学的研究も進んできているので興味ある方は筆者たちの文献3) やその文献を参照するとよい．

なお，歴史的には GL モデルが提案された後で，アブリコソフが GL 方程式を使って第二種超伝導体の存在と渦糸の六角形格子の配列を予言した．この頃 **BEC 理論**も現れ超伝導のミクロなメカニズムが明らかになったときであるが，アブリコソフの予想は GL 理論を基にしており，後に実験によってその正当性が証明された．

*10) 理論的には $\kappa = \lambda/\xi < 1/\sqrt{2}$ のとき第一種超伝導体で，$\kappa > 1/\sqrt{2}$ のとき第二種超伝導体となる．この κ は GL パラメータと呼ばれる．

9. おわりに

超伝導分野は，20 世紀の初頭の超伝導の発見に始まり，1950 年の BEC 理論の完成を見た後，ジョセフソン効果など様々な興味ある現象が発見された．1985 年の銅酸化物の高温超伝導体の発見も有名で BEC 理論の見直しを余儀なくされた．最近では鉄系を含む物質も見つかっており，今後も理論的発展や応用が期待されている．超伝導現象には GL 理論で説明できないものもあり，GL 理論は超伝導の物理的な研究分野全体の中では決して中心的ではない．しかし，上で述べた超伝導に特徴的なマクロな現象を GL 方程式で記述することができ，現象論的な理解のためには必須といってよい重要な役割をしている．一方，GL 方程式は数学的な研究対象としても大変魅力的である．その面白さを全部伝えるのは難しいが，ここではマクロな現象と数学的理論が見事に適合する例としてその面白さの一端が伝われば幸いである．

最後に参考とした文献および興味ある読者のための文献として，数学的な GL 方程式の研究については，すでに紹介したが，文献3) を，超伝導現象の物理的な入門書としては文献4) を薦める．後者は専門外でも読みやすい．その他，物理サイドの定評ある書籍として，文献5～7) を挙げておく．

参考文献

1) 『物理学大辞典 第2版』，編集委員長　牧二郎，丸善，2001.
2) キッテル／山下次郎，福地充訳，『キッテル 熱物理学 第2版』，丸善，1983.
3) 神保秀一，森田善久，『ギンツブルク・ランダウ方程式と安定性解析』，岩波書店，2009.
4) 青木秀夫，『超伝導入門』，裳華房，2009.
5) 家泰弘，『超伝導』，朝倉書店，2005.
6) ティンカム／青木亮三，門脇和男共訳，『超伝導入門（物理学叢書）上，下』，吉岡書店，2004, 2006.
7) 恒藤敏彦，『超伝導・超流動』，岩波書店，1993.

（もりた・よしひさ，龍谷大学理工学部）



学而時習之，不亦説乎

米谷　民明

この連載企画を編集部に提案したのは，実は私である．本誌をより親しみやすくするのに何か案がないかということで，学生の頃「自然」という科学雑誌に連載されていた『我が師，我が友』というシリーズがあったのを思い出した．それぞれの分野で足跡を残された先達のたどった道筋が自身の言葉で率直に語られているのが貴重で，今の若い読者にとっても同趣旨の企画が意味あるのではないかと考えたのである．私は漠然とかなり上の世代の先生方を思い浮かべていたが，執筆者の人選は編集スタッフに一任したところ，物理の最終回を私が担当するはめになった．『我が師，我が友』シリーズは1962年からの連載終了後，単行本として1967年に出版されている．私が読み出したのは，大学入学（1965年）後で，「自然」連載中よりも本になってから読んだものが多い．気が滅入ったときなど，何度も読み返したものである．

自分が書く段になってみると，果たして私が学生時代に感銘を受けたような意味で，現在の学生諸君に読んでもらえるようなものを書けるかどうか，そもそも語るべき内容があるだろうかと，忸怩たる思いにかられ投げ出したくなる．しかし，仕方がない．大学時代，院生・助手時代から研究員としてのニューヨーク滞在時代を中心に思い出すことを書いてみよう．

1. 物理への興味とアインシュタインへの憧れ

小さい頃の私は，大変要領の悪い鈍い子であった．足し算を習ったとき，位上げの理屈がわからず，最初どうしても規則を飲み込めなかった．先生の説明ではなぜそうするのかがわからず自分で考えてやっと理屈が納得できて，初めて計算ができるようになった．周りの子はすらすらやっているのに，自分にはどうしてもできなかったときの，何か複雑でやりきれない気持ちを今でも朧げに覚えている．逆に，みんなができなかった応用問題を自分だけが解けて，先生に褒められたこともあったのを思い出す．

どうもその辺りに私の理論物理学者への原点があるようだ．数学と理科は好きであったが，社会や国語，理科でも生物関係にはあまり興味を持てなかった．小学校時代は，子供向けの科学雑誌「子供の科学」というのを定期購読していて，自分の家で電気分解の実験，モーターの自作とか，真空管ラジオの自作（主に通信販売のキット）などを楽しんでいた．実は，絵を描くのが大好きで，それ以外の時間はたいてい絵を描いていた．何も考えずに一人で絵を描いているときが自分にとって一番幸せな時間であったのである．将来は画家は無理だとして，例えば建築家になれたらと思っていた．

興味の持てない科目は全く勉強しなかった．今でもそうだが，私には自分に興味があることしか何もやる気がなく面倒くさがりやで，記憶力もあまり良いほうではないので，広くデータや情報を集めるとか分類する，というような分野は不得意である．その一方，興味を持ったことについては多少偏っても仕組みや理屈を理解したいという気持ちは強く，哲学書や長編文学書もこれはと思ったものには，時間をかけて取り組むのが好きだ．

物理，それも理論物理というものを最初に意識したのは，アインシュタインへの興味からであった．小学4～5年頃であったか，クリスマスプレゼントとして貰った学習百科事典をめくっていて出会ったアインシュタインの写真に引かれ読んだ記事で，相対性理論というものに妙に引きつけられたのである．世の中にはそんな深淵な理論があるのかという気持ちで，それ以来アインシュタインの名はずっと私の心に残った．だが子供心にも自分にはとてもそんな深淵な理論を追求する能力はないと決めつけていた．ところが，高校2年生の頃だったと思うが，本屋をのぞいていたとき，偶然に『相対論の意味』（矢野健太郎訳，岩波書店）という本が目に入った．アインシュタイン自身が著者で，プリンストン大学での講義をもとにしたものであることがわかり，迷わず購入し読み始めた．私が自分のものとして最初に手にした理論物理の本ということになる．もちろん当時の私の知識・学力では理解できるはずもない．だが，一部分にしろ，意外と分かった気になった．特に，一般相対論の場の方程式は，記号の意味すら本当には分かっていないのに，とにかく「美しい」ものだという感覚を強く持ったのである．これは多分，同じ頃に手に入れて読んでいた伝記（ゼーリッヒ著，広重徹訳『アインシュタインの生涯』）から受けた印象との相乗効果だったのだろう．どこまで追求できるかわからないが，それを真に理解できるようなところまでは数学と物理を学びたいという気持ちになった．

そういうこともあって高校時代は，物理学者や数学者の伝記を読み漁った．アインシュタインとともに私の憧れになったのは，ピエール・キューリーである．マリー・キューリーについても娘エーブが書いた伝記を読んでいて，夫ピエールの人柄や業績に感動したのである．事故によるピエールの死後，マリーが書いたピエールの伝記（渡辺慧訳，白水社）があるのを知って手に入れた．それによりピエールが追求したという対称性の原理を知り，物理学の理論の美しさをもっと深く理解したいという気持ちをますます強くした．

北大に進学してからは，札幌丸善の洋書売り場によく通った．できるだけ翻訳ではなく原著を読みたいという欲求からである．ペーパーバックで様々な古典があるので，少ない小遣いを貯めてその購入に費やした．そのため，ドイツ語やロシア語の勉強もある程度はやった．ある日，書棚に『相対論の意味』の原著英語版があるのを見つけた．高校生のときに買った日本語版のほうは，親戚の子に貸してしまい長年月が経ち手元にはない．また，アインシュタイン，ローレンツ，ミンコフスキー，ワイルの論文の英訳を集めた Dover 版の『Principle of Relativity』という本も同じ頃手に入れた．大学1, 2年頃はこれらの理解のための勉強に時間のかなりの部分を費やした．物理学科への進入が近づいた2年後半頃からは，量子論の面白さに強く引かれるようになり，ディラックの教科書のリプリント版を読み始め，相対論と違った独特な論理の不思議さのほうに魅力を感じ，相対論に増す興味を持つようになった．こちらのほうも初期の原論文を集めてある本を入手してその理解につとめた．

2. 学部から大学院の頃

物理学科の講義ではあまり印象に残ったものはないが，4年生で大学院進学が決まった後，卒業研究として原子核理論の田中一先生のゼミに参加し，超伝導を勉強することになったときの思い出がある．原子核への応用に関連したペアリング相互作用の論文を読んだのだが，田中先生は，相互作用項を最初に対角化してから，運動項を摂動で扱う強結合展開の計算を工夫してみたらと言われた．

それで，アイソスピン波動関数の合成に関する公式を色々と自分で案出し計算をしてレポートをまとめた．田中先生にその内容を研究室セミナーで話してごらんと言われ短い報告をし，スタッフの方々にアドバイスをいただいた記憶がある．もちろん，まだ研究に値するものでは全くなかったが，自分でもある程度はできるかなという，最初の手がかりのようなものを得られたような気がする．

その頃の私の消極的な性格を示す思い出がある．ある日，理学部の係から呼び出しがあったので行ってみると，私がデービッド・サーノフ RCA スカラーシップアワードというのに選ばれたという．そんな賞があるのは全く知らなかったので驚いた．全国の大学の理科系学生から数十人が選ばれ，授賞式が東京のホテルで開催されるから出席するようにと招待状を渡された．しかし，その頃の私は引っ込み思案の出不精から，知らない人との会合というものが大嫌いで，成人式も出席してないし，結局，受賞式には出席しなかった．また，大学院進学のときも，他大学のことが頭にないわけではなかったが，高校から大学のときと同じように札幌でそのまま北大大学院に進学した．自宅から通学でき，そのほうがそれまで通り好きな本やレコードを買って楽しみながら，経済的にも余裕を持って研究者を目指せると思い，他に出るのはおっくうという気持ちが勝った．

大学院は素粒子論研究室で金沢昭先生に指導を受けることになった．金沢先生によると場の理論は自分で勉強すれば良いから，最先端に早く近づけるように，「レッジェポール理論」，「流れ代数理論」のレビューや原論文などを先輩院生と輪講するゼミを M1 の最初から始めようということになった．この種の理論については学部時代接したことがなかったので，私にとっては大変だった．金沢先生は厳しい方であやふやな議論をするとすぐ指摘され，このゼミのおかげで自分を鍛えることができたと思っている．同時に，良き先輩，同輩，後輩の友人にも恵まれ，大学院５年間を楽しく過ごせた．進学当初はちょうど学園紛争の時期で多少巻き込まれかけはしたが，私は典型的なノンポリ学生で活動的な学生等からは常に距離を置いていて，さしたる影響は受けなかった．

3. 修士論文と博士論文の頃

私が大学院に入る（1969 年）前年に，イタリアの若手研究者ヴェネチアノによってなされた提案がきっかけになり，当時の呼び方では双対共鳴模型（デュアル・レゾナンス・モデル，現在の弦理論につながる）の大流行が始まっていた．私は M1 の最初の頃は，ゼミの影響でレッジェポール理論を場の理論により基礎づけるような研究ができないかと漠然と考え，場の理論で複合粒子を取り扱う方法などについて勉強を進めた．先輩院生らの強い勧めがあって若手夏の学校に参加したが，そのときにはまだ双対共鳴模型の話題について議論されていたかどうかは意識しておらず，複合粒子に関連すると思われた非コンパクト群対称性に基づく無限成分場の理論などのセッションに参加して発表を聞いた．そこで南部陽一郎先生の論文などについて知り，早速読んだ．

M1 の夏休みが終る頃に，ヴェネチアノの仕事とその後の急速な進展について先輩院生から伝えられた．そして，相対論的弦によるヴェネチアノ振幅の解釈に関する，サスキントの論文や南部先生の論文に接して衝撃を受けた．レッジェポールとか流れ代数という現象論的枠組みと形式論に傾いた議論とは違って，弦の物理から振幅を理解できるというのは，実に新鮮に感じられた．そういうわけで，修士課程のテーマには双対共鳴模型を選んだ．もとの振幅はユニタリ性を満たしておらず，ループ効果を入れてユニタリな理論を構成する仕方に関するプログラムを提案をした吉川–崎田–ヴィラソロの論文や，演算子形式を議論したフビニ–ヴェネチアノの論文等を詳細に検討し，新しい工夫ができないか考えた．修士論文から博士論文にかけたこの頃の研究については，他に書いた*1)のでここではごく簡単にしか触れないことに

*1）出版予定の本 “The birth of string theory” (Cambridge Univ. Press) の収録論文 *Gravity from strings: personal reminiscences of early developments* (arXiv:

する．いずれにしても，69～71年頃はまだ弦の量子力学を本格的に議論できる段階には達しておらず，私の研究も基本的には，振幅のS行列としての数学的構造に基づいてその性質を拡張することを主体とするものだった．

特に，もとの振幅の提案が全くレッジェポールのS行列理論に基づくものであり，場の理論との関係が私には疑問で，修士論文の後，博士課程の研究テーマとして，双対弦理論と場の理論との関係を考察することにした．対称性の観点からのゲージ理論との関係，および振幅の因子化とファインマン・ルールの関係についてである．どちらもある程度の進展をさせたとは思うが，本当にやりたいことはどうしてもできなかった．

ゲージ理論との関係を考察するうちに，弦理論と一般相対性理論との関係に思い当たった．そこで，とりあえずできる範囲で，その関係を明確にしておくのも意味があるだろうと考えて，D2の後半辺りからその問題を集中的に考えるようになった．そのきっかけは，京大基礎物理学研究所（略して基研）での滞在であった．出不精の私を見かねてかD1になったある日，卒業研究でお世話になった田中先生から，基研に武者修行という制度があるから是非利用したらよいと言われた．この忠告に従い，D2の5月頃に1カ月ほど滞在した．基研滞在中は，隣の数理解析研究所におられた中西襄先生に時々議論していただいた．その少し前に一般化されたヴェネチアノ振幅の積分領域の分解に関する中西さんのお仕事をループ振幅に拡張することに成功していたので，さらに進めて，弦の場の理論を構成できないかと，滞在中はかなり頑張った．しかし，私自身の力不足に加えて，当時（1972年）はまだ後の弦場理論の構築の鍵になるような弦の量子論の定式化方法が知られていなかった．要するに機は熟しておらず，私の試みは方向は正しかったにしても失敗に終わった．私がやりたかったことは，それから13年後にウイッテンによって見事に成し遂げられた．

0901.0079)，および，パリティ Vol.**19** (2004), 50「特集：量子重力」所収のエッセイ「弦から重力だって！」を参照．

この失敗をきっかけに学んだことの一つは，物理的イメージの大切さである．私の試みは，今から見れば皮相と言わざるを得ない数学的形式に頼っていて，柔軟な発想に欠けていた．その後は，とかく生半可な形で数学のほうに傾きがちな自分にブレーキをかけることがしばしばあった．できるだけ単純な物理的イメージにより物事の本質を直観的にえぐり出すことのほうが，数学的構造だけの追求より重要なのだ，自分はそれを目指すべきだという考えが，後の経験も経て次第に強まった．

また，この失敗があったが，むしろそれにより回り道して時間はかかったが，対称性に着目してすでにD1の頃思い当たっていた弦理論と一般相対論との関係を考え直してみようという気持ちに自分を切り替えることができた．結果として，D3の初夏（1973年）の頃，閉じた弦と一般相対性理論の関係についての研究を一応まとめる段階に達した．それが博士論文になった．この研究には自分としては多くの点で不満で，論文執筆中の重苦しい気持ちをよく思い出す．しかし，まだ誰もやっていない問題だったので，それなりのインパクトはあった．今から考えると，この仕事の不満足・不完全さに関連した問題は，課題として私のその後の研究に後々まで長く影響した．後の格子ゲージ理論，弦場理論，時空不確定性，行列模型，ゲージ重力対応などに関する私の仕事の多くにおいて，かすかな通奏低音として響いているようだ．

関連した余談を一つ：話は今から2年程前に飛ぶ．先の脚注で触れたこの頃の私の考えを回想した文章についてだ．これは2007年にフィレンツェで開催され，私も招待された弦理論の歴史を主題とした国際会議と関連して出版されることになった本への寄稿論文なのだが，友人等の勧めでアーカイブに載せたところ，すぐにウイッテン氏から次のようなメーセージを受け取った．

「Dear Tamiaki, Thanks very much for posting to the web your very illuminating article of reminiscences, which I just read. It is very interesting to read about your thoughts in

the early period when you were grappling with questions that are still puzzling us today. Ed Witten」

今となってはその頃の私の悩みを分かってもらうのは難しいだろうからアーカイブに載せる意味があったかどうか不安だったが，彼のような指導的人物に理解されたと知って気が休まる思いがした．

4. 学振研究員から助手へ

博士課程を終えた(1974年春)が，すぐには就職先がなく学術振興会奨励研究員としてそのまま北大で研究を続けた．就職難時代であったが，金沢先生からは1年程度待てば物理学科助手のポストにつける可能性があることを聞いた．博士論文になった研究がある程度注目され，研究会講演や学会特別講演を依頼されたり，初めて国際会議で招待講演をしたりと忙しい日々が続いた．出不精の私も否応なしにあちこち出かけることになり，外との交流の大事さを身にしみて分かるようになった．そうこうしているうち，1975年6月途中から助手に就任した．

1974年夏頃を境に，弦理論への人々の関心は，一般的には急速にしぼんだ．臨界次元だとか，重力理論との関係が明らかになったことでハドロン理論としての意味が疑われるようになった内在的原因もあるが，最大の理由は，双対共鳴模型の起源であるハドロンの強い相互作用が，実は量子色力学（QCD）というゲージ理論で記述できることが明確になったことである．私自身は，弦理論にはまだまだ追求すべき点が残っているとは思ったが，ここらで少し研究の方向を変えてみるのもよい，QCDや統一ゲージ理論の発展を学びながら新しいテーマを探そうという気持ちになりつつあった．

博士課程を終わった年の夏，思いがけず，当時CERNに滞在中の原康夫先生（筑波大）からお手紙をいただいた．それによると，ロンドンで開かれた国際会議で，双対弦理論と重力との関係が話題になったとのことであった．また，私に是非海外に渡るようにというアドバイスもいただいた．アメリカならカリフォルニア工科大学か，数年前に崎田文二先生が着任して強力な研究グループができているニューヨーク市立大学がよいだろう，もし前者なら自分が推薦状を書いてあげることもできるし，後者ならすでに崎田さんとは話しているとのことであった．数年前，原さんが集中講義で北大に来られていたが，私のことを覚えてくれていて，しかも，このような暖かいアドバイスをいただいたのには大変感激した．また，秋の学会の折，ニューヨーク市立大学から帰国したばかりの吉川圭二先生と初めてお会いできた．吉川さんからはニューヨークのことやアメリカの研究環境のことなどを親しく聞き大変刺激になり，ニューヨークに行きたいと思うようになった．ちょうどその頃助手の話が具体化しそうになっていた．崎田さんに手紙で事情をお伝えしたところ，助手のポストにつけるならそのほうがよい，1年ほど助手のデューティーを果たしてからニューヨークに来ることはできないかということで，幸い，北大の物理教室にも認めていただき76年9月から2年間のニューヨーク滞在が実現した．

5. ニューヨーク研究員時代

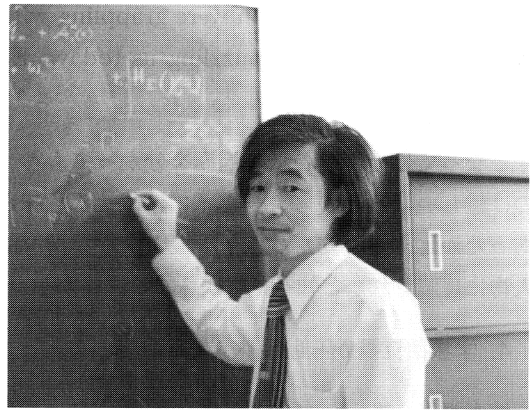
ニューヨーク（以下NYと略）到着時には崎田先生がわざわざ空港まで迎えに来てくれていた．崎田さんの勧めでインターナショナルハウスに住んだ．便利で居心地もよく2年間住み続けた．着いて翌日だったか，若い学生さんが一人私のハウス部屋に来て，紹介したい人がいると言って会わせてくれたのが，ユーゴスラヴィア出身のアンタル・ジェビッキ氏（現ブラウン大学教授）だった．彼はまだ25歳の若さだったが，ちょうど崎田さんのところでPh. Dを終えてポストドクとしてプリンストン高級研究所に採用され引っ越し準備の最中だった．また，大学では出勤初日からオフィスに落ち着く間もないくらいに，一人の大変活発なインド人の院生が議論をしたいと言って押しかけてきた．その頃博士論文の準備を開始していたスペンタ・ワディア氏（現タタ研究所理論科学研究センター長）であった．以来34年になるが，こ

の二人とはずっと親密な付き合いを続けている．

住まいのほうが落ち着いて大学に通い出してからは，ほとんど毎日のようにワディア氏と議論をするようになった．ときにはかなり激しい議論で，喧嘩別れのようになってしまったこともある．NYに来てから書いた最初の論文は彼との共著である．長い付き合いのわりには，彼との共著論文はこの1編だけなのが自分でも意外が感じがする．一方，ジェビッキ氏とは場所が離れたので，何度か電話を通じて議論したことがあった以外は，NY滞在中はそれほど深い付き合いはなかった．彼との付き合いは，むしろ私が帰国して東大駒場に助教授として着任（1980年春）してしばらく経ってからである．彼は私が帰国する少し前にブラウン大学に採用され今に至っていて，数えきれないほど相互訪問を繰り返している．学術振興会招聘研究員として来ていただいた80年代終わり頃から共同研究が始まり，共著論文もかなりの数になる．

70年代中盤頃，崎田さんが率いていたNY市立大学の素粒子論研究室は，ユーゴ，インド，スペインや南米諸国などからの留学生で優秀な人がたくさんいた．先にあげた二人はその代表だが，他にも，やはりユーゴ出身のG. センジャノヴィッチ氏（現トリエステ国際理論物理学研究所教授）などが大変活発であった．彼とは物理の議論もしたが，遊び仲間でもあり，郊外の屋内スケートリンクに何度か通いスケートを楽しんだのをなつかしく思い出す．崎田研究室は，まさに論語学而第一にある「学んで時に之を習う．亦説ばしからずや．朋あり遠方より来る，亦楽しからずや」の趣を呈していた．もし他の場所に行っていたとしてもまたそれなりに別の出会いがあったではあろうが，その後それぞれの立場で国際的に活躍している優れた人たちと出会い，交流が始まったという意味で，私のNY滞在は時期的にも真に幸運であった．また，余暇には好きな音楽，オペラ，絵画などの鑑賞を存分に堪能できた．古い日本映画などについてもNYで初めて接し，改めて日本文化の素晴らしさも認識させられた．

物理に関しては，到着後数週間の頃ブルックヘブン研究所で会議があり，トホーフト（G. t' Hooft）氏が講演するというので院生数人と出かけたときのことを衝撃的な出来事として鮮明に思い出す．トホーフト氏の講演は，それまでの乏しい経験の中では，とびきりすばらしいものだった．それは二重の意味で衝撃であった．まず私の目には彼は24〜5歳の学生にしか見えないほど若かった．こんなに若い人が，これほど堂々たる講演をしたのに圧倒された．実際には，彼は私より1歳年上であることが後に分かって，驚きは少し和らいだ．また，話の主題が，それまで私が知らなかった「インスタントン」であったことも大変ショックであった．そのときのセッションでは，確かファン・ニューベンホイゼン（P. van Nieuwenhuizen）氏の「超重力理論」の話もあった．こちらのほうも私には初耳であった．インスタントンについては，その1〜2カ月後，ウイッテン氏のセミナーも聞いた．当時まだプリンストンの学生だった彼の初々しい様子が今でも目に映る．



NY市立大学のオフィスにて（1978年）．

こんなに重要な問題の両方とも，日本にいるときにはほとんど話題になっておらず，私自身も全然認識していなかったのに衝撃を受けたのである．そのため，渡米後の数カ月はそれらに関係する論文や数学の勉強を急いだ．日本で計算をすませていてNYで暇ができたら論文にしようと思っていたものを含めて5編ほど異なるテーマで論文を書いたのだが，かなりあせった気持ちになっていたようだ．着眼点は悪くないにしても，俄仕立てと

いう感が否めないような論文がある．

多分，崎田さんもそれをお感じになったのであろう，ある日次のような忠告をいただいた．もう論文は十分に書いたから論文を書かなくてよい，残りの1年をかけてこれから何をやるべきかよく考えたほうがよい，というのである．これには本当に衝撃を受けたが，まことに適切な良い忠告をしていただいたと感謝している．実際にそれから7〜8カ月は論文を書けなかった．その頃に出たトホーフトの非可換ゲージ理論の相の分類の論文に刺激を受け，格子ゲージ理論上での実現に関する少し長い論文を78年の5月頃になって書いたのが，その後の最初の論文になった．こちらのほうは崎田さんもある程度気に入ってくれたようだ．この仕事をきっかけに，その後2〜3年ほどクォーク閉じ込めの証明ができないかという考えに取り付かれて頑張ったことがあったが挫折し，再び，何をやるべきか悩む日々がその後しばらく続いたのを思い出す．

この仕事についてのセミナーをしたときのことも思い出す．驚いたことに当時NY市立大学学長で，アメリカの素粒子論学会の大御所的存在であったマルシャク（R. Marshak）先生が一番前におられるではないか．マルシャクさんは，セミナーに現れることはよほど特別の場合を除いてなかったのである．多分，崎田さんが知らせてくれていたのであろう．私の話へのマルシャクさんのコメントや質問は実に的確であった．私のNY到着後数カ月の頃，先生の還暦を記念する国際会議が市立大学の主催で開催されたので，60歳を少し過ぎたお年であったと思う．この会議についても，南部先生を含むそれまで名前だけで知っていた錚々たる顔ぶれ（H. Bethe, Y. Ne'eman, A. Salam, C.S. Wu女史，A. Pais, L. Glashow, T. Regge, C.N. Yang, ···）の招待講演者やバンケットスピーカーに接することができ強い印象に残っている．

こんなふうに思い出はつきない．崎田先生とのことなどで，他にも書いておきたい事柄が多いが，きりがない．ここらで終えよう．NY滞在の終了とともに，私の遍歴時代も終わりを告げた．もちろん，その後も失敗があり悩みが続いた．それらは，いつのまにか60歳を過ぎ，定年まで30年を過ごした東大を去った今でも，私にはまだあまりに生々しい．最後に，この場を借り，お世話になった諸先生，友人の方々に深く感謝申し上げたい．

（よねや・たみあき，放送大学教養学部）

特　集（2011 年 3 月号予告）

方程式と現代代数学

代数で語る方程式の面白さ

本体 952 円

方程式をめぐる代数の世界	桂　利行
行列と１次方程式	木村　俊一
代数方程式	清水　勇二
解ける代数方程式	小林　正典
体と代数方程式	三宅　克哉
5 次方程式と微分方程式	落合　啓之
行列と微分方程式	加藤　晃史
数論と方程式	伊吹山知義
［コラム］	梅村　浩
《名著に親しむ》	森脇　淳
［インタビュー］	桂　利行

特　集（2011 年 1 月号）

数論の探求

ゼータからその世界に迫る

本体 952 円

ゼータへの旅	黒川　信重
多角数からゼータへ　紀元前から現代まで	黒川　信重
素数定理　ゼータとリーマン予想	平野　幹
数論的量子カオスとゼータ	小山　信也
有限体上の Hasse–Weil ゼータ関数の特殊値	斎藤　秀司
保型形式とゼータ	権　寧魯
非可換類体論の現状　ゼータ関数の解析接続法	伊藤　哲史
ラングランズ予想の展望	吉田　輝義
［コラム］名著をめぐって	髙瀬　幸一
［インタビュー］ゼータが拓く広大無辺な世界	黒川　信重
《人物で学ぶ数学》　第 1 回	砂田　利一
《現象から方程式を創り出す》　第 12 回	十河　清
《連載》　情報幾何の新展開　その 3	甘利　俊一

編集後記

特集で取り上げられているテーマを見てみると，いろいろな数学的手法が出ており，物理現象を読み解くのにこれだけ多様な数学が登場していることには驚きを隠せません．それと同時に長い間続いているであろう，人類の飽くなき探求心は大変素晴らしいものであると思います．

巻頭で，出口先生が「現在でも新しい数学的手法が次々に発展している．その理由として考えられることは，物理学を表現するために数学は本質的に必要な道具であり，物理科学の発展のためには新しい数学が欠かせない」と述べられていますが，物理科学の発展だけでなく，人間の知的好奇心を満たすためでもあるように思います．もしかすると，今回の特集内で取り上げた物理現象から，また，新たな数学手法が提案されたりするかもしれません．ただ，微積分の理論が様々な人々によって長い間の年月をかけて構築されてきたことを考えると，同じくらいの月日がかかってしまうように思います．

物理や数学は長い年月をかけて，飽くなき探求心を持って発展させていくものだと思います．早急に結果を問わず，焦らずに見ていきたいものです．　(R)

数　理　科　学　2月号

2011 年 2 月 1 日発行

数 理 科 学 編 集 部　　　　発行人 木　下　敏　孝
TEL. (03) 5474–8816
FAX. (03) 5474–8817

ホームページ　http://www.saiensu.co.jp
ご意見・ご要望は　sk@saiensu.co.jp　まで．

発行所 ⓒ 株式会社 サ　イ　エ　ン　ス　社　　TEL. (03) 5474–8500 (代表)
〒 151–0051 東京都渋谷区千駄ヶ谷 1–3–25　振替 00170–7–2387　(03) 5474–8600 (広告部)

印刷・製本　三美印刷株式会社　山岡景仁